

Direction Mécanique appliquée

Décembre 2007

Ref. IFP 60172

Centre de résultats : **Exploration – Production**

N° de projet : **Z0250**

N° d'étude : **001**

Niveau de confidentialité : **1**

Nombre d'exemplaires : **6**

Modélisation par Smoothed Particle Hydrodynamic des phénomènes de diffusion présents dans un écoulement

Thèse soutenue le 15 décembre 2005

Auteurs : Pierre-Victor CUEILLE

RESUME : Différents problèmes de Mécanique des Fluides sont étudiés avec la méthode lagrangienne Smoothed Particle Hydrodynamics, en mettant en œuvre des schémas numériques existants ou modifiés.

Dans le formalisme SPH, les équations de conservation se ramènent à des Equations Différentielles Ordinaires en temps, dont l'intégration est limitée par des conditions de stabilité de type Lipschitz. Dans le cas d'un écoulement de Poiseuille à bas nombre de Reynolds, une résolution implicite de l'équation de conservation de la quantité de mouvement a été implémentée. Elle permet des gains de temps-calcul importants. La renormalisation des opérateurs de différentiation spatiale permet d'assurer un ordre élevé de résolution, ce qui d'une part réduit l'erreur numérique liée à l'approximation et d'autre part, permet d'établir une formulation consistante des équations de conservation. Un nouveau schéma consistant pour l'opérateur Laplacien, PSE-Renormalisé, permet de gagner en efficacité grâce à une réduction du nombre d'opérations.

Des simulations de courants de densité induits par la gravité sont ensuite réalisées pour valider la méthode en se comparant à des expériences et à d'autres méthodes académiques performantes. L'approche classique monofluide Lax-Wendroff, qui considère une espèce par volume de contrôle et une diffusion visqueuse, s'avère insuffisante. Une nouvelle approche, de type BiFluide, permet de modéliser une diffusion de matière entre des espèces coexistantes dans la particule. Elle permet d'apporter naturellement de la stabilité au calcul. Par ailleurs, en privilégiant l'approche Godunov par rapport à l'approche Lax-Wendroff, la résolution séparée de la partie hyperbolique des équations accroît l'ordre de la méthode, et permet de reproduire les déformations des interfaces.

Travail réalisé dans le cadre d'un contrat : oui – non

Partenaires, clients, universités :

Mots clés : Méthode sans maillage, renormalisation, consistance, stabilité, schéma implicite, PSER, écoulement d'échange, schémas de Lax Wendroff et de VanLeer (MUSCL).

Mémoire de THÈSE

présenté en vue de l'obtention de grade de

Docteur de l'Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse

Spécialité : Mécanique

présenté par

Pierre Victor CUEILLE

Modélisation par Smoothed Particle Hydrodynamics des phénomènes de diffusion présents dans un écoulement.

Thèse soutenue le 15 Décembre 2005

Composition du Jury :

M. E. Fontaine	Ingénieur de recherche - Institut Français du Pétrole	Promoteur de Thèse IFP
M. S. Huberson	Professeur - LEA Poitiers	Président
M. Ph. Poncet	Maître de conférences - INSA Toulouse	Examineur
M. J.P. Vila	Professeur - INSA Toulouse	Directeur de thèse
M. P. Villon	Professeur - Université Technologique de Compiègne	Rapporteur

Thèse préparée au sein de la

Direction Mécanique Appliquée - Institut Français du Pétrole

*Département de **G**énie **M**athématique et **M**odélisation - INSA de Toulouse*

Table des matières

Introduction	8
I Modélisation	13
1 Approche Lagrangienne	14
1.1 Introduction	14
1.2 Bilan de matière pour un volume de contrôle	15
1.3 Equation de bilan monophasique	17
1.3.1 Conservation de la masse	17
1.3.2 Conservation de la quantité de mouvement	17
1.3.3 Loi d'état	19
1.3.4 Conservation de la quantité de mouvement adimensionnée	19
1.4 Equation de bilan diphasique	21
1.4.1 Modèle Bi-Fluide	21
1.4.2 Loi d'état de mélange, modèle de relaxation	22
1.4.3 Equation de diffusion des constituants	26
1.4.4 Conservation de la quantité de mouvement	27
2 Méthode Numérique	
Smoothed Particle Hydrodynamics	28
2.1 Introduction : Intérêt de l'approche avec SPH	28
2.2 Formalisme particulaire	29
2.2.1 Fondement de la méthode	29
2.2.2 Passage à une somme discrète	29
2.2.3 Discrétisation de l'opérateur gradient	32
2.2.4 Consistance de la formule de quadrature	34
2.2.5 Convergence de la méthode pour les équations de conservation	37
2.2.6 Amélioration par renormalisation	38
2.2.7 Lois de conservation avec le formalisme particulaire	41
2.2.8 Interprétation de l'équation de continuité comme la conservation du volume	43

2.2.9	Conclusion pour le formalisme	44
2.3	Traitement des conditions limites	45
2.4	Schéma numérique pour la partie hyperbolique	47
2.4.1	Discrétisation de la conservation de la masse	47
2.4.2	Discrétisation de la quantité de mouvement	47
2.4.3	Transport	48
2.5	Nécessité de modéliser la diffusion	49
2.6	Schéma SPH pour la diffusion numérique	50
2.6.1	Expression de la viscosité numérique de pression	50
2.6.2	Approche explicite des équations d'Euler avec une diffusion numérique pour la stabilisation	53
2.6.3	Conclusion	55
2.7	Schémas SPH pour la diffusion physique	56
2.7.1	Formes hybrides	57
2.7.2	Forme $(\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla})$ renormalisée	60
2.7.3	PSER : Formulation type PSE de l'opérateur de diffusion	61
2.7.4	Précision des différents schémas	62
2.8	Stabilité de l'Equation Différentielle Ordinaire	63
Conclusion de la première partie		65
II Résolution des équations de Navier-Stokes monofluide		67
3	Simulation d'écoulement à bas nombre de Reynolds	68
3.1	Equations du problème	69
3.2	Ecoulement de Poiseuille 2D plan	69
3.2.1	Solution analytique	69
3.2.2	Simulation instationnaire d'un écoulement	70
3.2.3	Condition aux limites	71
3.2.4	Conditions initiales	72
3.2.5	Paramètres numériques	72
3.2.6	Interprétation des résultats	72
3.3	Résultats avec une approche explicite de la contrainte visqueuse $div \tau$. . .	73
3.3.1	Cas $Re = 10^{-2}$	73
3.3.2	Cas $Re = 1$	74
3.4	Apport de la renormalisation	77
3.5	Critère de stabilité temporelle	78
3.6	Conclusion	80

4	Approche implicite de la contrainte visqueuse $div \tau$	81
4.1	Introduction	81
4.2	Résolution d'une équation de diffusion	82
4.2.1	Formulation matricielle de $\vec{\nabla} \vec{v}$	83
4.2.2	Formulation matricielle de $\Delta \vec{v}$	84
4.3	Résolution d'une équation de convection-diffusion	90
4.3.1	Euler : ordre 1	90
4.3.2	θ -schéma : ordre supérieur à 1	91
4.3.3	Solveur itératif-Temps calculs	92
4.4	Applications	92
4.5	Conclusion	94
5	Approche de la contrainte visqueuse avec PSER	95
5.1	Approche explicite	95
5.1.1	Cas $Re = 10^{-2}$	96
5.1.2	Cas $Re = 1$	97
5.2	Formulation implicite	97
5.2.1	Etape 1 : calcul de la constante locale de renormalisation C_i	97
5.2.2	Etape 2 : approche matricielle pour $\langle \Delta u \rangle_i^{PSE}$	98
5.3	Résolution d'une équation de convection-diffusion	99
5.3.1	Euler : ordre 1	99
5.3.2	θ -schéma : ordre supérieur à 1	99
5.3.3	Temps calculs	100
5.4	Conclusion	100
	Conclusion de la seconde partie	101
III	Ecoulements multiphasiques : courants de densité	102
6	Introduction aux courants de densité	103
6.1	Description	104
6.2	Modèle hydraulique de Benjamin [3]	107
6.3	Comment expliquer l'existence d'une dissipation	110
6.4	Conclusion	111
7	Simulation d'écoulements d'échange	112
7.1	Un nouvel outil de description des courants de densité	112
7.1.1	Simulation Directe avec des méthodes académiques d'ordre élevé	113
7.1.2	Avec SPH	115
7.1.3	Perspectives	116
7.2	Modèle monofluide	116

7.2.1	Equations du problème sans dimension	117
7.2.2	Présence de turbulence	118
7.3	Mise en oeuvre numérique avec SPH : Equation d'Euler	119
7.3.1	Choix du schéma	120
7.3.2	Marche en temps	120
7.4	Conclusion	121
8	Approche monofluide	122
8.1	Objectifs	122
8.2	Discretisation initiale	123
8.3	Ecoulements d'échange [34] : Article soumis au Congrès Français de Mécanique 2005	124
8.4	Comparaison à une approche VOF : FLUENT	131
8.5	Commentaires sur les résultats obtenus	133
8.6	Comment capter les échelles de diffusion présentes à l'interface ?	134
8.7	Conclusion	135
9	Approche bifluide	136
9.1	Modèle SPH bifluide	137
9.1.1	Définition de la fraction volumique initiale	137
9.1.2	Modèle continu	137
9.1.3	Approche numérique	139
9.2	Rupture de barrage, Solution de Ritter	140
9.3	Ecoulements d'échange avec SPH bifluide	142
9.3.1	Résultats	143
9.3.2	Conclusion pour l'approche SPH bifluide	144
9.4	Modèles numériques pour le modèle bifluide	146
9.5	Approche bifluide SPH-MUSCL	147
9.5.1	Similitude avec une approche Volumes Finis du formalisme SPH	148
9.5.2	Solveur de Riemann exact	149
9.5.3	Flux d'ordre supérieur : VanLeer-MUSCL	150
9.5.4	Mise en oeuvre pratique	151
9.6	Validation du modèle bifluide dans le cas de Boussinesq	151
9.6.1	$Gr=2300$	152
9.6.2	$Gr=230000$	154
9.6.3	$Gr = 2.28 \cdot 10^7$	155
9.6.4	Conclusion	158
9.7	Ecoulement d'échange avec SPH MUSCL bifluide	159
	Conclusion de la thèse	163

Introduction

Pour l'ensemble de la chaîne industrielle pétrolière, les confrontations récurrentes aux problèmes relevant de la mécanique incitent les acteurs du domaine à utiliser les outils de simulation numérique pour aider à la prise de décision. Plusieurs sociétés ou institutions, dont l'Institut Français du Pétrole, développent à cet effet des logiciels pour l'ingénierie amont (réservoir, production polyphasique, techniques offshore), mais aussi aval (techniques d'applications énergétiques). Ces logiciels peuvent rendre compte de phénomènes mécaniques divers et agissant dans des régimes transitoires. La simulation numérique propose de quantifier leur échelle et leur durée, ce qui permet de prédire leur évolution et, pour l'utilisateur, les conséquences d'une décision.

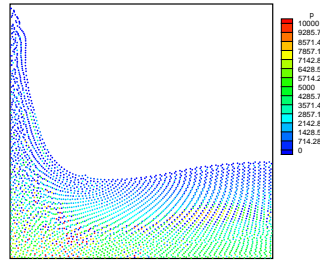


FIG. 1: Vague générée par une rupture de barrage, calcul réalisé avec SPH [13].

Une des grandes difficultés rencontrées par ces simulations est le traitement de problèmes discontinus avec grand mouvement d'interface. Les méthodes usuelles eulériennes exploitées dans les logiciels sont encore en développement. Quand elles s'appliquent pour le domaine de l'ingénierie offshore, avec la modélisation de la houle par exemple, il faut mettre en oeuvre un algorithme spécial de suivi d'interface. Cette technique oblige à faire une concession sur la précision, et d'accepter la propagation dans le temps de l'erreur induite. Logiquement vient alors l'idée d'utiliser des méthodes lagrangiennes ne nécessitant pas d'algorithme spécifique de suivi d'interface. Celles-ci ont confirmé les attentes fondées sur un meilleur comportement, par exemple en hydrodynamique. De mise en place simple, elles ont fait leur popularité sur les calculs d'écoulements en surface libre (Fig1).

Parmi elles, Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) fut proposée par Lucy en 1977 pour des applications astrophysiques [54]. Rapidement reprise, puis développée par Monaghan, Gingold et Benz [7] [56] dans les années 1980 à 1990, elle fut étendue à la résolution de problèmes de Mécanique des Milieux Continus.

Compte tenu de leur polyvalence, les méthodes de type SPH font l'objet de recherches dans de nombreux laboratoires, pour améliorer la précision des algorithmes, diminuer le temps CPU, et valider de manière systématique les résultats des simulations numériques. Aux Etats Unis, elles sont développées, entre autres, à l'Université de Californie, Los Alamos et Santa Barbara, ainsi qu'au California Institute of Technology.

Au cours de la thèse est né un groupe de travail Français SPH. Celui-ci est constitué, outre l'Institut français du Pétrole, de l'INSA de Toulouse (Laboratoire de Mathématiques Appliquées à la l'Industrie et à la Physique), de l'Ecole Centrale de Nantes (Laboratoire de Mécanique des Fluides), de l'Ecole Centrale de Lyon, du Laboratoire National d'Hydrodynamique et d'Environnement (LNHE) de l'EDF et du Cemagref Grenoble. Des méthodes similaires sont mises en oeuvre à l'Ecole Supérieure d'Ingénieurs de Marseille (Laboratoire d'Hydrodynamique), à l'Université du Havre (Groupe d'Energétique et de Mécanique du Havre) et à Poitiers. Récemment, l'ouverture de ce groupe sur l'Europe a pu être réalisée en prenant contact avec un groupe SPH existant aussi en Italie, à l'Université de Pavie [31].

Cette communauté "européenne" des méthodes sans maillage est active. Une des premières étapes fût la constitution d'une bibliographie commune. Par la suite, le déroulement d'ateliers de travail commun (IFP 2003, IFP-LNHE 2004, Pavia 2005) puis une Ecole d'été (Ecole Centrale de Lyon 2005) confirment un intérêt commun durable pour le sujet.

Un des premiers logiciels dédié au calcul prédictif fut développé pour des applications militaires (SMART FLUIDS [49]) mais a trouvé à l'époque des limites dans la puissance des machines de calcul. Dans le domaine aéronautique, l'aptitude de la méthode à traiter l'interaction fluide-structure fut saisie pour simuler les impacts d'oiseaux dans un réacteur [51].

Aujourd'hui, quelques logiciels sous licence utilisent en partie SPH (DYNA, PAM-SHOCK [43]). D'autres logiciels sont développés à des fins commerciales parmi des organismes de recherche, comme le CSIRO en Australie, pour simuler le moulage de pièces en tenant compte de géométries complexes 3D [75].

Applications de SPH à la Mécanique des Milieux Continus

La notion de méthode particulaire ne doit pas prêter à confusion avec la dynamique moléculaire. C'est un modèle numérique qui s'applique à la Mécanique des Milieux Continus. Une méthode lagrangienne comme Smoothed Particle Hydrodynamics peut, sur un domaine spatial, ne calculer que sur la zone du phénomène physique et discrétiser de façon naturelle et précise les zones de comportement complexe. Les interfaces n'ont plus besoin d'un traitement spécifique puisqu'elles résultent de l'arrangement mutuel des particules constituant le domaine physique. Leur suivi se fait donc naturellement.

D'abord utilisée pour le calcul de la fission et pour les nuages interstellaires, cette méthode a ensuite été appliquée au milieu mécanique fluide. En hydrodynamique, les auteurs ont vérifié la capacité de SPH à décrire le déferlement de vagues [59] [62][64].

L'utilisation assez aisée de la méthode et les résultats spectaculaires qu'elle donne posent problème quand on cherche à contrôler leur validité mathématique discrète par rapport aux équations qu'on entend résoudre au niveau continu. L'intervention de mathématiciens [42] [52][56][84] a permis de modifier la méthode et de l'améliorer dans plusieurs domaines (stabilité, consistance).

Dans le même temps, il apparaît de première importance de valider la prise en compte des conditions limites [80] où deux approches existent, mais manquent de robustesse vis à vis de la géométrie des problèmes. L'utilisation des conditions limites du domaine physique, propre à la méthode, permet de simuler certains problèmes d'interaction fluide-structure [76]. Mais SPH peut aussi traiter la mécanique du solide où là encore les problèmes d'interface tels les impacts, les fractures, les endommagements et perforations font l'objet d'articles [7] [52].

Avec des traitements divers de la dissipation visqueuse, [66][67][88] les équations de Navier-Stokes ont pu être envisagées et traitées. Les écoulements de fluides newtoniens ont alors fait l'objet de nombreuses études, au travers des exemples récurrents de Poiseuille et de Couette. Mais dans l'ensemble, la simulation de ces équations n'est pas validée expérimentalement, et pose des problèmes de temps-calculs importants.

Si on étend à des lois de comportement non-newtoniennes, SPH peut être utilisée pour les milieux viscoplastiques avec des modèles bivisqueux [35]. Ces études ont été reprises et développées en France au Cemagref. Confrontée à l'expérience, la méthode montre de bons résultats, validés par l'expérience [47]. Avec une approche viscoplastique, les milieux granulaires peuvent ainsi être traités par SPH [35][48] [70].

En modélisation de la turbulence, peu de travaux ont été réalisés. C'est principalement l'équipe d'EDF qui a travaillé sur le sujet, en réalisant une simulation des Grandes Echelles (LES) [40]. D'autres études sur le traitement de la turbulence ont été réalisées par ailleurs à Pavie.

Objectifs pour la thèse

Les articles existants laissant entrevoir des perspectives dans les écoulements visqueux et l'hydrodynamique, la décision a été prise de développer à l'Institut Français du Pétrole un savoir-faire lié à cette méthode au travers d'un projet X, au sein de la division Mécanique Appliquée. Pour prendre une part dans le développement de la méthode SPH, et s'orienter dans la voie des domaines d'application de l'industrie pétrolière, il est décidé de viser des applications pour lesquelles la méthode semble adaptée mais où les développements actuels sont sommaires.

Compte-tenu des modèles physiques à considérer, et surtout de la qualité des modèles numériques existants dans le formalisme, décrits en partie I, il est utile de diriger l'étude sur la modélisation d'écoulements très visqueux (partie II), avec une validation plus générale de la méthode sur des cas expérimentaux et multiphasiques (partie III).

Les cas envisagés peuvent être : l'écoulement de boues de forage, les écoulements polyphasique soumis au slugging, la phase de redémarrage d'une conduite obstruée, le déroulement d'une avalanche sous-marine.

Le cadre universitaire du doctorat, assuré à l'INSA Toulouse, a évolué en un partenariat. Le code de recherche développé par le directeur de thèse, Jean-Paul Vila, fut choisi comme support au départ de la thèse, une évolution concertée de cet outil étant décidée.

La partie I décrit donc la modélisation générale présente dans la thèse. Son premier chapitre rappelle l'établissement des lois de conservation de la matière et de la quantité de mouvement. Le second chapitre décrit les principes de la méthode SPH, puis les améliorations proposées dans la littérature. Les problèmes diffusifs rencontrés dans la thèse (matière, quantité de mouvement) nous ont conduit à nous intéresser au traitement de la diffusion par la méthode. Une étude générale des opérateurs de diffusion discrets est donc présentée. Les opérateurs laplaciens de la littérature n'étant pas tous satisfaisants, nous avons proposé un nouveau schéma inspiré de PSE, adapté aux distributions irrégulières de particules.

La partie II décrit les études et développements réalisés pour la résolution d'écoulements visqueux incompressibles. Le troisième chapitre teste les différents schémas dits classiques sur l'écoulement de Poiseuille plan 2D. Les quatrième et cinquième chapitres présentent les travaux réalisés pour améliorer la résolution temporelle. Une analyse des conditions de stabilité temporelle nous a conduit à opter pour une modification du code qui permet une résolution implicite de la contrainte visqueuse, tolérant de plus grands pas de temps que dans la résolution explicite. Réalisée pour les deux schémas consistants à notre disposition, cette modification, inédite, a dû être, dans un premier temps, formulée de façon continue, puis codée en utilisant des options judicieuses pour la performance. Le rapport décrit les modalités de cette résolution : choix du solveur, du stockage de la matrice du

système linéaire, de la formulation du tenseur des contraintes visqueuses, du traitement des conditions limites.

La partie III cherche à valider la méthode sur des applications référencées intéressantes pour l'IFP et le formalisme. Dans le domaine des problèmes à grands mouvements d'interface, des expérimentateurs [34][44], et des modélisateurs [3][8][27][36] ont étudié le problème des écoulements gravitaires.

Ce cas développe des instabilités physiques qui sont susceptibles de mettre à mal la méthode. La dissipation physique y est faible mais agit fortement sur le déroulement du phénomène. C'est une bonne manière de tester la diffusion numérique des schémas et leur incidence sur la physique.

Sur les cas expérimentaux que l'on tente de simuler, la méthode SPH classiquement décrite ne rend pas compte du mélange des espèces à l'interface et ne permet pas de recueillir toutes les informations que d'autres auteurs obtiennent avec des simulations plus complètes. En effet, la diffusion de matière intervient de manière prédominante sur la physique du problème. Pour la modéliser, et fermer le problème élargi par l'ajout d'une nouvelle équation de conservation de la masse, nous avons utilisé le modèle bifluide de Chantepedrix & al. [15], qui considère le milieu isobare dans chaque volume de contrôle. Une loi de diffusion des espèces apparentée à la loi de Fick permet de modéliser le flux des espèces.

L'étude des écoulements d'échange a pu être reprise, munie d'un modèle physique complet correspondant au phénomène. Des résultats obtenus avec d'autres méthodes numériques ont proposé une manière de valider le problème et l'utilisation d'un code eulérien (Volumes Finis eulérien / INSAT) résolvant le même modèle physique a permis une comparaison sur les cas désirés. Sur le régime d'écoulement correspondant à celui de Boussinesq miscible, elle conclut que la méthode SPH bifluide classique est trop diffusive numériquement pour rendre compte du phénomène.

Pour monter en ordre de résolution, une approche différente pour la résolution des flux peut améliorer le formalisme en résolvant la partie hyperbolique des équations à l'aide d'un solveur de Riemann exact. Cette approche est testée et permet d'obtenir des résultats plus conformes à ceux prédits par le code eulérien et la littérature.

Première partie

Modélisation

Chapitre 1

Approche Lagrangienne

1.1 Introduction

L'objet du chapitre est de présenter la forme continue des équations qui vont être résolues par la méthode lagrangienne “Smoothed Particle Hydrodynamics”. Lors de sa mise en oeuvre, l'approche permet de modéliser les domaines étudiés, qu'ils soient fluides ou structures, non pas par un maillage, mais par un ensemble de points de contrôle représentant des volumes élémentaires de matière, dont on peut, si besoin, suivre le mouvement. C'est ainsi que se définit le formalisme lagrangien, ou particulaire.

A l'usage, ces points de contrôle sont désignés par le terme “particules”, car on leur affecte une masse m et une densité ρ . Connaissant leur position à chaque instant, on peut formuler les équations de la mécanique des milieux continus sur le domaine physique qu'ils représentent, pour peu qu'on leur ait associé les propriétés mécaniques nécessaires, ainsi que leurs conditions initiales. Ces particules vont se déplacer et interagir au travers des forces surfaciques et volumiques usuellement considérées.

Pour obtenir la formulation lagrangienne de l'évolution de ces particules, on raisonne sur les lois de conservation de la physique (matière, quantité de mouvement, énergie). Celles-ci peuvent s'écrire de deux manières pour le volume de contrôle considéré, en étant strictement équivalentes au niveau continu.

Une forme considère le volume de contrôle fixe, c'est la forme dite eulérienne, la plus répandue chez les mécaniciens, tandis que la forme lagrangienne, qui nous intéresse ici, le conçoit mobile. Il en résulte une différence de comportement lors de la mise en oeuvre discrète.

Pour cerner les raisons qui justifient leur prédisposition à modéliser certains type de phénomènes, et comprendre la mise en oeuvre d'une méthode lagrangienne, nous décrivons brièvement la différence entre les deux approches au travers d'un simple bilan de matière.

1.2 Bilan de matière pour un volume de contrôle

Soit un domaine fluide divisé en volumes de contrôle V , remplis de matière de densité ρ et de vitesse physique \vec{v} . Ces fonctions vitesse et densité sont supposées suffisamment régulières pour établir les lois de conservation. Le volume V est un volume arbitraire, donc on suppose qu'il est mobile. Il peut toutefois rester fixé à sa position initiale. Les quantités citées par la suite seront dimensionnelles. Chaque volume de contrôle est délimité par une frontière qui est la surface $S = \partial V$.

On cherche donc à expliciter le taux de variation de la masse $\int_V \rho dV$ présente initialement dans le volume V , au cours d'un intervalle de temps dt , pour proposer les modélisations eulériennes et lagrangiennes du problème. On se place dans des conditions où la quantité de matière présente initialement dans V se conserve :

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV = 0 \quad (1.1)$$

Une variation de ρ s'explique par l'existence d'un flux à travers sa frontière :

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_S \vec{F}_{Total} \cdot \vec{n} dS = 0 \quad (1.2)$$

Le volume de contrôle peut échanger de la matière avec le milieu qui lui est extérieur. Ce flux de matière, si il est sortant, entre dans un volume de contrôle voisin, qui représente ce milieu extérieur. Un raisonnement analogue peut être conduit pour un flux de matière entrant. La direction des flux est donnée par la normale extérieure \vec{n} . Ce modèle vérifie bien que si la matière n'est soumise à aucun flux, elle se conserve.

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = 0$$

Le flux \vec{F}_{Total} subi par V se définit comme la somme de deux phénomènes de transport : convection et diffusion.

$$\vec{F}_{Total} = \vec{F}_{Convectif} + \vec{F}_{Diffusif}$$

Dans cette section, on a supposé le volume de contrôle rempli d'une seule matière, c'est-à-dire que le milieu est monophasique. On ne peut donc pas avoir de flux d'espèce dans V . La diffusion n'intervient pas et le flux est purement convectif :

$$\vec{F}_{Total} = \vec{F}_{Convectif} = \rho \vec{v}$$

Le flux convectif se fait dans le système grâce au mouvement des volumes de contrôle et n'existe pas dans un milieu immobile. En utilisant, le théorème de Green-Ostrogradsky, l'équation de conservation globale de la masse sur V se ramène à une somme d'intégrales

de volumes :

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_S \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dS = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_V \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) dV = 0 \quad (1.3)$$

Le volume étant arbitraire, la somme des expressions contenues dans les intégrales doit être identiquement nulle. C'est l'expression eulérienne de l'équation de continuité locale :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (1.4)$$

Pour coupler l'évolution temporelle et convective des variables du volume de contrôle, telle ici la densité, les mécaniciens ont pour usage d'écrire le flux convectif sous la forme développée usuelle :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \rho = -\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \quad (1.5)$$

Au niveau continu, on écrit ainsi les équations de conservation avec une composée de dérivées partielles ∂_t et $\vec{v} \cdot \vec{\nabla}$. On a ainsi défini la dérivée totale (1.6) :

$$\frac{d}{dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \quad (1.6)$$

qui permet d'écrire :

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \quad (1.7)$$

C'est ici qu'intervient l'hypothèse de la mobilité du volume de contrôle, définissant deux traitements du flux convectif $\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v})$, et donc deux formulations des lois de conservation, eulérienne et lagrangienne. Si le volume de contrôle est fixe, les deux composantes du flux qui apparaissent dans (1.5) sont calculées, éventuellement de manière conservative via $\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v})$. C'est le modèle eulérien. Mais si le volume de contrôle se déplace à la vitesse physique convective \vec{v} , la part du transport de ρ qui se fait grâce au terme $\vec{v} \cdot \vec{\nabla}$ du flux convectif est prise en compte implicitement dans (1.6). Seul $\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v}$ est à calculer au second membre. C'est le cas lagrangien.

La vitesse de transport doit être logiquement la vitesse physique du milieu. V est alors un volume matériel. Mais le choix de cette vitesse est libre : une vitesse de transport qui n'est pas celle du domaine définit en partie une approche ALE et se justifie dans plusieurs cas de figure. Cette question sera reprise et discutée dans les sections [1.4] et [2.4.3].

1.3 Equation de bilan monophasique

L'approche continue des lois de conservation se fait dans le cadre lagrangien, et nous décrivons donc, dans un premier temps, le cas d'un milieu à un constituant. Nous exprimons ici les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement, au cours du temps, sous la forme lagrangienne. Nous ne résolverons pas l'équation de conservation de l'énergie car nous nous plaçons dans l'hypothèse d'un écoulement isotherme. Le milieu étant supposé compressible, la définition d'une loi d'état est nécessaire pour fermer le problème. Ainsi, en reliant pression et densité, il est possible de maîtriser la compressibilité du milieu. Celle-ci se règle en outre par l'adimensionnement de l'équation de conservation de la quantité de mouvement.

Cette section décrit un modèle que l'on dénommera monofluide, pour le différencier d'un autre modèle, utilisé par ailleurs et décrit dans la suite.

1.3.1 Conservation de la masse

Pour tout volume de contrôle, on a donc classiquement, en considérant qu'il est transporté par sa vitesse physique \vec{v} :

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \quad (1.8)$$

Pour des raisons liées à la méthode numérique SPH, et qui seront décrites en (2.2.1), le milieu devra par la suite être considéré comme compressible ($\vec{\nabla} \cdot \vec{v} \neq 0$). Toutefois les domaines d'étude de cette thèse se placeront dans des régimes incompressibles. Pour les atteindre, on utilise une hypothèse de quasi-incompressibilité en considérant $\vec{\nabla} \cdot \vec{v} \simeq 0$. Cette hypothèse, et ses conséquences, sont décrites au travers de l'adimensionnement de la pression dans l'équation de quantité de mouvement. On peut noter que cette approche est au final la plus proche de la réalité physique, puisque tout milieu possède un coefficient de compressibilité non nul. Ce coefficient est naturellement présent dans notre approche et peut être réglé.

1.3.2 Conservation de la quantité de mouvement

Le principe fondamental de la dynamique indique que le taux de variation de la quantité de mouvement du volume V est égal à la somme des forces extérieures appliquées. Si l'on répète le raisonnement conduit en (1.2) sur la matière, mais pour la quantité de mouvement, on obtient :

$$\frac{d}{dt}(\rho \vec{v}) = \vec{\nabla} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \vec{f}_{ext} \quad (1.9)$$

Les forces surfaciques sont exprimées par le tenseur de contraintes de Cauchy :

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau} \quad (1.10)$$

La pression est connue, via la loi d'état. La contrainte visqueuse $\boldsymbol{\tau}$ dépend de la viscosité dynamique μ du fluide ainsi que de sa viscosité de dilatation μ' [14].

$$\boldsymbol{\tau} = \mu(\vec{\nabla}\vec{v} + \vec{\nabla}\vec{v}^T) + (\mu' - \frac{2}{3}\mu) (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \mathbf{I} \quad (1.11)$$

On considèrera la viscosité dynamique μ constante dans toute la suite. Notre hypothèse générale d'incompressibilité nous a conduit à négliger le second terme de (1.11). Ainsi :

$$\boldsymbol{\tau} = \mu(\vec{\nabla}\vec{v} + \vec{\nabla}\vec{v}^T) \quad (1.12)$$

et par conséquent la contrainte, dans le cas newtonien incompressible, se réduit à :

$$\vec{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau} = \mu \Delta \vec{v}$$

Les forces volumiques extérieures \vec{f}_{ext} seront détaillées si besoin dans la suite. Par défaut on considère qu'elles se réduisent à la gravité \vec{g} . En tenant compte de $\nu = \mu/\rho$, on obtient ainsi l'équation de Navier-Stokes :

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = -\frac{\vec{\nabla}p}{\rho} + \nu \Delta \vec{v} + \vec{g} \quad (1.13)$$

Cette forme est dimensionnelle et couvre le cas général. Elle prédit la vitesse sous les effets de trois types de forces : une est associée au gradient de pression, une à la contrainte visqueuse et la dernière à la gravité. Mais l'équation (1.13) peut dégénérer vers des formes simplifiées. Par exemple, si la contrainte visqueuse est petite en norme devant les forces volumiques et le gradient de pression, ($|\vec{\nabla}p|, |\rho\vec{g}| \gg |\vec{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau}|$), on rejoint asymptotiquement l'équation d'un écoulement de fluide parfait :

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = -\frac{\vec{\nabla}p}{\rho} + \vec{g} \quad (1.14)$$

De même, si la gravité est grande devant la contrainte visqueuse et le gradient de pression, le régime est celui d'écoulement torrentiel :

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{g} \quad (1.15)$$

Les applications envisagées pour la méthode, dans le cadre de cette thèse, s'incrivent dans les régimes où, à la différence de (1.14) et (1.15), aucun terme ne prévaut sur le domaine. On évalue toutefois leur influence vis à vis de $d\vec{v}/dt$, grâce à l'adimensionnement des équations en introduisant les nombres de Reynolds Re et de Froude Fr . Il est ainsi possible de procéder à la simulation de phénomènes physiques documentés en se plaçant dans le même régime adimensionnel. Les régimes des cas choisis peuvent être reproduits numériquement si l'on respecte les rapports entre les effets physiques en jeu, donnés par les paramètres.

1.3.3 Loi d'état

La méthode SPH dans sa formulation standard nécessite de considérer un milieu compressible, ce qui numériquement présente des avantages mais requiert une équation supplémentaire pour déterminer la pression. C'est la loi d'état qui va permettre de fermer le problème modélisé. Cette hypothèse de compressibilité du milieu crée des ondes acoustiques se déplaçant à vitesse finie dans le domaine. Leur célérité est :

$$c = \sqrt{\frac{\partial p}{\partial \rho}} \quad (1.16)$$

Elles agissent sur la physique du système en se couplant aux ondes convectives. En imposant cette vitesse du son c , on règle la compressibilité du milieu, en la découplant des ondes convectives, un milieu incompressible ayant en théorie une célérité infinie. Ce réglage se fait grâce au nombre de Mach décrit plus loin. Le milieu est barotrope, c'est-à-dire que la pression p est donnée par une loi d'état $p = p(\rho, c)$. On utilise la loi d'état proposée par A. Chorin, similaire à une loi d'état thermodynamique des gaz parfaits, [16], la célérité étant choisie constante :

$$p(\rho) = p_0 + c_0^2(\rho - \rho_0) \quad (1.17)$$

Le choix de la constante permet d'avoir une pression nulle lorsque le milieu n'est pas sous contrainte. Avec $p_0 = c_0^2 \rho_0$:

$$p(\rho) = c_0^2 \rho \quad (1.18)$$

Dans le cas où l'on cherche à décrire les couplages existant entre deux milieux de compressibilités différentes tels que l'air et l'eau, une autre loi d'état, la forme de Tait [59], permet de régler différemment le modèle.

$$p(\rho) = p_0 + \frac{c_0^2 \rho_0}{\gamma} \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right] \quad \gamma = 7 \quad (1.19)$$

Pour chaque espèce, au travers de γ , on impose les valeurs de la célérité dans les milieux, ce qui équivaut à régler les échelles de pression dans l'eau et l'air.

Dans les deux cas, on peut choisir p_0 pour avoir $p = 0$ sur la surface [59]. On remarque que (1.19) dégénère vers (1.17) pour $\gamma = 1$. La forme de Tait (1.19) est la plus répandue mais ne présente pas d'intérêt à être utilisée en monophasique.

1.3.4 Conservation de la quantité de mouvement adimensionnée

Pour pouvoir interpréter l'équation (1.13) dans des cas divers, on en écrit une forme adimensionnée. Cette manipulation simplifie l'appréhension du phénomène puisque l'influence des paramètres présents dans cette équation peut s'exprimer, pour chaque effet physique, par l'intermédiaire d'un nombre adimensionnel. Ces nombres offrent en plus la possibilité

de quantifier les couplages éventuels. Soit H, v_0 et ρ_0 , trois échelles caractéristiques de longueur, de vitesse et de densité :

$$\begin{aligned} x &= H \hat{x} \\ y &= H \hat{y} \\ \vec{v} &= v_0 \hat{\vec{v}} \\ t &= T_0 \hat{t} \\ \rho &= \rho_0 \hat{\rho} \end{aligned}$$

En adimensionnant l'équation de continuité (1.8), on obtient l'échelle de temps caractéristique du phénomène :

$$T_0 = \frac{H}{v_0}$$

La fluctuation de pression δ_p sera liée à l'amplitude de la variation de densité présente dans le domaine. Soit ρ_{lim} la densité extrême rencontrée dans le domaine qui induit cette amplitude :

$$\delta_p = |\rho_{lim} - \rho_0| c_0^2$$

En reprenant les notations de la littérature ([56],[66]), on désigne la variation relative de la densité par la quantité δ :

$$\delta = \frac{|\rho_{lim} - \rho_0|}{\rho_0}$$

En utilisant les variables adimensionnées, on obtient pour (1.13) :

$$\frac{d\hat{\vec{v}}}{d\hat{t}} = -\frac{\delta c^2}{v_0^2} \frac{\hat{\vec{\nabla}} \hat{p}}{\hat{\rho}} + \frac{\nu}{v_0 H} \hat{\Delta} \hat{\vec{v}} + \frac{gH}{v_0^2} \vec{e}_0 \quad (1.20)$$

avec δ_p l'échelle caractéristique des fluctuations de pression et $\vec{g} = g\vec{e}_0$. Finalement, la forme adimensionnelle de (1.13) est :

$$\frac{d\hat{\vec{v}}}{d\hat{t}} = -\frac{\delta}{M^2} \frac{\hat{\vec{\nabla}} \hat{p}}{\hat{\rho}} + \frac{1}{Re} \hat{\Delta} \hat{\vec{v}} + \frac{1}{Fr^2} \vec{e}_0 \quad (1.21)$$

que l'on a obtenue en définissant les trois nombres adimensionnels M , Re et Fr :

$$M = \frac{v_0}{c}, \quad Re = \frac{v_0 H}{\nu}, \quad Fr = \frac{v_0}{\sqrt{gH}}$$

La vitesse caractéristique v_0 constitue la vitesse de référence nécessaire pour calculer le nombre de Reynolds. Classiquement, celle-ci est prise comme la vitesse physique asymptotique de l'écoulement. Mais ce peut être une vitesse moyenne, locale ou maximale. Re détermine la prépondérance des effets visqueux sur les effets d'inertie quand v_0 est la vitesse inertielle. De même, le nombre de Froude Fr nous sera utile dans l'étude des courants de densité pour quantifier la vitesse induite par les effets de flottabilité et la vitesse inertielle. Couplé à la fluctuation relative de densité δ , le nombre de Mach M permet d'adimensionner le gradient de pression et de régler les effets liés à la compressibilité.

1.4 Equation de bilan diphasique

La modélisation des applications multiphasiques nécessite d'ajouter aux équations établies précédemment la possibilité de considérer une diffusion de matière qui avait été jusqu'ici négligée. Dans le cas de phénomènes réunissant deux milieux fluides distincts spatialement, considérer deux milieux non miscibles équivaut à considérer implicitement une tension de surface dans l'écoulement.

Un aspect déroutant d'une approche lagrangienne diphasique est que le mouvement des particules dans le domaine, qui constitue un flux convectif, figure un mélange des espèces. Pourtant, cet effet ne s'interprète pas comme un modèle de diffusion de matière. Dans le cadre d'une approche diphasique, il faut donc modéliser la diffusion de matière existante, et contrôler l'effet de ce transport lagrangien.

L'approche diphasique choisie sera l'approche Bi-Fluide [15], c'est-à-dire qu'en chaque volume de contrôle cohabitent deux fluides. En utilisant deux espèces, on doit assurer la conservation de la masse de chaque constituant, celle de la quantité de mouvement, mais aussi utiliser une loi d'état qui va dépendre des densités des deux milieux.

En cas de disparition de l'un des deux constituants, on doit retrouver les équations du milieu monophasique décrit précédemment. C'est la propriété de dégénérescence des équations, qui permet de traiter correctement les cas asymptotiques où une espèce domine en présence. La loi d'état devra donc être accompagnée d'une seconde équation pour fermer le problème. Physiquement, on conçoit qu'une équation d'équilibre des pressions entre les deux milieux soit un bon critère.

1.4.1 Modèle Bi-Fluide

La coexistence est donc quantifiée par la fraction volumique de chaque espèce dans le volume V que l'on dénote dans toute l'étude ϕ_k pour le milieu k . Une condition nécessaire est que les espèces k de fraction massique ϕ_k remplissent le volume de contrôle :

$$\sum_{k=1,2} \phi_k = 1. \quad (1.22)$$

Cette condition constitue la contrainte de saturation. Dans le cas diphasique, les fonctions ϕ_k sont telles que la densité volumique de mélange ρ , c'est-à-dire la densité du volume de contrôle, soit de la forme :

$$\rho = \phi_1 \rho_1 + \phi_2 \rho_2 \quad (1.23)$$

Cette forme peut s'interpréter comme la somme de densités réduites $\tilde{\rho}_k = \rho_k \phi_k$:

$$\rho = \tilde{\rho}_1 + \tilde{\rho}_2 \quad (1.24)$$

La masse du fluide k dans le volume de contrôle est donnée par :

$$m_k = \int_V \rho_k \phi_k dV = \int_V \tilde{\rho}_k dV \quad k = 1, 2 \quad (1.25)$$

1.4.2 Loi d'état de mélange, modèle de relaxation

Loi d'état

L'objectif est de travailler avec un milieu barotrope dont la loi d'état définisse la pression du mélange comme une fonction des pressions de chaque constituant :

$$p^* = \phi_1 p_1 + \phi_2 p_2 \quad (1.26)$$

Les pressions $\phi_1 p_1$ et $\phi_2 p_2$ représentent des pressions rapportées à l'espace occupé par chaque espèce. Si leur somme p^* correspond à la réelle pression équivalente du mélange, cette définition vérifie l'hypothèse faite par Dalton pour calculer la pression d'un mélange de gaz.

L'hypothèse est faite que la pression de chaque constituant n'est fonction que de sa propre densité. Pour chaque espèce, la pression hors contrainte (cas où $\rho_k = \rho_{k0}$) est p_{k0} . La loi d'état utilisée a donc une forme analogue à celle utilisée en monophasique :

$$p_k(\rho_k) = p_k\left(\frac{\tilde{\rho}_k}{\phi_k}\right) = p_{k0} + c_k^2(\rho_k - \rho_{k0}) \quad (1.27)$$

Puisque le mélange se réduit à deux constituants, dans toute la suite, on pose $\phi_1 = \phi$ et $\phi_2 = 1 - \phi$, qui permet de dégénérer vers un modèle monophasique à surface libre quand $\phi = 0$ ou 1 :

$$p^* = \phi p_1\left(\frac{\tilde{\rho}_1}{\phi}\right) + (1 - \phi) p_2\left(\frac{\tilde{\rho}_2}{1 - \phi}\right) \quad (1.28)$$

L'utilisation d'un seul et même nombre de Mach pour caractériser la propagation des ondes acoustiques dans les deux milieux peut se justifier. Dans les zones d'écoulement où le mélange est dégénéré, M correspond à la valeur obtenue en monophasique. Dans les zones où le mélange est tel que les fractions volumiques sont du même ordre, si les célérités imposées pour chaque milieu sont égales, le nombre de Mach là encore dégénère vers la valeur obtenue en monophasique. Dans le cas ultime où les célérités sont d'ordres différents dans le mélange, le milieu qui agit physiquement sur l'écoulement est le plus compressible. Il faut pouvoir travailler à des échelles de temps inférieures à celles des ondes acoustiques les plus rapides. C'est donc sur la célérité de ce milieu que doit être basé le nombre Mach. C'est pourquoi on raisonne avec la vitesse du son la plus grande :

$$M^2 = \frac{v_0^2}{(Max c_k)^2} \quad (1.29)$$

Dans le cas où le milieu est non-dégénéré, il faut fermer le système par une équation supplémentaire, l'équilibre des pressions entre les deux milieux est un bon critère [15].

$$p_1\left(\frac{\tilde{\rho}_1}{\phi}\right) = p_2\left(\frac{\tilde{\rho}_2}{1 - \phi}\right) \quad (1.30)$$

Une conséquence de l'égalité (1.30) est :

$$p^* = p_1 = p_2 \quad (1.31)$$

Chaque constituant a la même pression dans l'espace V . Ce résultat peut être retrouvé par un raisonnement thermodynamique simple, en cherchant à respecter le premier et le second principe. Dans un cadre plus général, un raisonnement mécanique utilisant le principe de moindre action permet d'obtenir ces résultats, en apportant plus d'informations sur le système [72].

Approche Thermodynamique Classique

En raisonnant sur la masse des constituants, on peut mener un raisonnement qui retrouve (1.31), sans utiliser la fraction volumique ϕ . On considère ainsi les milieux immiscibles. On définit une loi de mélange sur la densité équivalente du mélange par :

$$\rho = \frac{m}{V}$$

Le système est doté d'une énergie de mélange totale E et massique e :

$$E = me$$

mais aussi d'une entropie totale et massique :

$$S(m, V, E) = ms(\rho, e)$$

Si la masse m est constante dans le système :

$$Tds = \frac{p}{\rho^2}d\rho + de$$

ce qui équivaut à :

$$\frac{\partial s}{\partial e}(\rho, e) = \frac{1}{T}, \quad \frac{\partial s}{\partial \rho}(\rho, e) = -\frac{p}{\rho^2 T}$$

On considère un mélange binaire, m_k est la masse du composant k , l'ensemble est dans une enceinte de volume V . Le système est fermé et les composants n'échangent pas de masse entre eux, les masses m_1 et m_2 sont constantes. On suppose de plus que chaque composant occupe une partie propre du volume total V_k et dispose d'une énergie $E_k = m_k e_k$. Pour pouvoir appliquer le premier principe sur le système, on suppose pour le milieu équivalent :

$$\left\| \begin{array}{l} m = m_1 + m_2 \quad \text{avec} \quad \frac{dm}{dt} = 0 \\ V = V_1 + V_2 \quad \text{avec} \quad \frac{dV}{dt} = 0 \end{array} \right.$$

A chaque constituant, on associe sa densité "propre" ρ_k dans le volume qu'il occupe :

$$\rho_1 = \frac{m_1}{V_1}, \quad \rho_2 = \frac{m_2}{V_2} \quad (1.32)$$

Sur l'entropie, on fait l'hypothèse selon laquelle l'entropie de mélange S est la somme des entropies propres S_k des constituants, sans terme croisé sur les espèces.

$$S = S_1 + S_2 = m_1 s_1(\rho_1, e_1) + m_2 s_2(\rho_2, e_2) = m s(\rho, e) \quad (1.33)$$

C'est-à-dire que S_1 , (resp S_2) ne dépend pas de la présence de l'autre constituant S_2 (resp S_1). Les seules variables de S sont donc ρ_1, ρ_2, e_1 et e_2 .

Pour déterminer la loi de mélange, on maximise l'entropie globale S sous la contrainte du premier principe, c'est-à-dire que l'on raisonne à énergie interne et volume minimal.

$$m_1 e_1 + m_2 e_2 = E = m e \quad (1.34)$$

et

$$V = \frac{m}{\rho} = V_1 + V_2 = \frac{m_1}{\rho_1} + \frac{m_2}{\rho_2} \quad (1.35)$$

Pour établir cela, on utilise le théorème des extréma liés, qui découle de l'utilisation des multiplicateurs de Lagrange.

$$\nabla_{\rho, e} S = \lambda (\nabla_{e_1, e_2} V, \nabla_{e_1, e_2} E) + \mu (\nabla_{\rho_1, \rho_2} V, \nabla_{\rho_1, \rho_2} E) \quad (1.36)$$

On en déduit :

$$\begin{aligned} \left(m_1 \frac{\partial s_1}{\partial \rho}(\rho_1, e_1), m_2 \frac{\partial s_2}{\partial \rho}(\rho_2, e_2), m_1 \frac{\partial s_1}{\partial e}(\rho_1, e_1), m_2 \frac{\partial s_2}{\partial e}(\rho_2, e_2) \right) &= \lambda (0, 0, m_1, m_2) \\ &+ \mu \left(-\frac{m_1}{\rho_1^2}, -\frac{m_2}{\rho_2^2}, 0, 0 \right) \end{aligned}$$

où encore

$$\begin{aligned} \left(m_1 \frac{p_1}{\rho_1^2 T_1}, m_2 \frac{p_2}{\rho_2^2 T_2}, \frac{m_1}{T_1}, \frac{m_2}{T_2} \right) &= \lambda (0, 0, m_1, m_2) \\ &+ \mu \left(-\frac{m_1}{\rho_1^2}, -\frac{m_2}{\rho_2^2}, 0, 0 \right) \end{aligned}$$

et donc

$$\frac{1}{T_1} = \frac{1}{T_2} = \lambda = \frac{1}{\theta}$$

et par suite

$$p_1 = p_2 = -\frac{\mu}{\lambda} = \pi$$

Reste à établir que π et θ sont respectivement la pression et la température thermodynamique du mélange, c'est-à-dire que $T = \theta$ et $\pi = p^*$ si on considère pour le milieu équivalent :

$$TdS = -p^*dV + dE$$

On considère maintenant le système avec m_1 et m_2 libres, mais vérifiant :

$$m_1 + m_2 = m \quad \text{avec} \quad \frac{dm}{dt} = 0 \quad (1.37)$$

soit,

$$dS = d(ms) = mds$$

$$dS = d(m_1s_1 + m_2s_2) = d(S_1 + S_2)$$

Ainsi pour chaque espèce, il faut raisonner sur l'entropie totale :

$$\theta dS_k = -\pi dV_k + dE_k$$

Ainsi,

$$mds = dS_1 + dS_2 = \frac{1}{\theta} (dE_1 - \pi dV_1) + \frac{1}{\theta} (dE_2 - \pi dV_2) \quad (1.38)$$

$$= \frac{mde}{\theta} + \frac{\pi}{\theta} dV \quad (1.39)$$

On en déduit que π et θ sont respectivement la pression et la température thermodynamique du mélange.

Fraction volumique d'équilibre [15]

Un choix judicieux de la loi d'état permet d'interpréter l'égalité (1.30) que l'on vient de démontrer comme une équation sur la fraction volumique ϕ . On suppose être en configuration isobare stable, donc les densités $\tilde{\rho}_1$ et $\tilde{\rho}_2$ sont connues par (1.27). Ainsi, l'équation d'équilibre des pressions se ramène à :

$$\frac{\tilde{\rho}_2 c_2^2}{\phi} - \frac{\tilde{\rho}_1 c_1^2}{1-\phi} + \rho_{i2} c_2^2 - \rho_{i1} c_1^2 = 0 \quad (1.40)$$

Pour simplifier, on introduit q et \tilde{q} :

$$q = \rho_{i2} c_2^2 - \rho_{i1} c_1^2 \quad (1.41)$$

$$\tilde{q} = \tilde{\rho}_{i2} c_2^2 - \tilde{\rho}_{i1} c_1^2 \quad (1.42)$$

ainsi que

$$\gamma = \frac{\phi}{1-\phi} \quad (1.43)$$

On est ainsi confronté à une équation polynômiale du second ordre sur γ :

$$\tilde{\rho}_2 c_2^2 \gamma^2 - \gamma(q - \tilde{q}) - \tilde{\rho}_1 c_1^2 = 0 \quad (1.44)$$

Pour obtenir une solution physiquement admissible, on se restreint à la racine positive γ^+ :

$$\gamma^+ = \frac{q - \tilde{q} + \sqrt{(q - \tilde{q})^2 + 4\tilde{\rho}_1 c_1^2 \tilde{\rho}_2 c_2^2}}{\tilde{\rho}_2 c_2^2} \quad (1.45)$$

qui permet d'obtenir la fraction volumique d'équilibre :

$$\phi^* = \frac{\gamma^+}{1 + \gamma^+} \quad (1.46)$$

1.4.3 Equation de diffusion des constituants

On envisage l'existence d'une diffusion des espèces. Deux équations de bilan de matière sur $k = 1, 2$ sont à considérer :

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} [\rho_k \phi_k] dV + \int_V \vec{\nabla} \cdot [\rho_k \phi_k \vec{v} + \rho_k \vec{q}_k] dV = 0 \quad (1.47)$$

$\rho_k \vec{q}_k$ est le flux de diffusion de matière d'un milieu dans un autre. Si on considère l'écoulement non-miscible, c'est-à-dire que $\rho_k \vec{q}_k = 0$, (1.47) devient :

$$\frac{d\tilde{\rho}_k}{dt} = -\tilde{\rho}_k \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \quad k = 1, 2 \quad (1.48)$$

Le modèle choisi ici a toutefois pour but de décrire le mélange de deux milieux. L'écoulement est miscible, c'est-à-dire que $\rho_k \vec{q}_k \neq 0$. Alors, pour chaque espèce, la masse est diffusée. Dans nos applications diphasiques, nous avons choisi une loi de diffusion dérivant de celle de Fick :

$$\rho_k \vec{q}_k = \rho \kappa \vec{\nabla} Y_k \quad (1.49)$$

où κ est un coefficient de diffusion d'une espèce dans une autre. Y_k est la fraction massique du mélange :

$$Y_k = \frac{m_k}{m} = \frac{\rho_k \phi_k}{\rho} \quad (1.50)$$

La loi de Fick exprime le flux de masse intervenant dans le système. Elle est légitime pour des gaz, grâce à un raisonnement cinétique. Dans le cas limite d'un gaz quasiment incompressible, c'est à dire un liquide, le fluide ne remplit qu'une part du domaine. Finalement, le bilan de matière pour la phase k s'écrit dans le cas général :

$$\frac{d}{dt}(\phi_k \rho_k) + (\phi^k \rho^k) \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = \vec{\nabla} \cdot (\rho \kappa \vec{\nabla} Y_k) \quad k = 1, 2 \text{ les phases en présence} \quad (1.51)$$

Par construction, puisque $\sum_k Y_k = 1$, cette forme permet quand on la somme sur les espèces k de retrouver l'équation de conservation pour le milieu équivalent :

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v}$$

Dans l'étude, pour des raisons liés au modèle numérique, cette condition sera vérifiée en assurant que ce sont les divergences des flux qui se compensent et non pas les flux eux-mêmes, voir en partie III. Pour obtenir une forme sans dimension, on considère pour les densités attachées aux espèces :

$$\rho = \rho_{k_0} \hat{\rho}$$

Ainsi, l'équation (1.51) s'écrit :

$$\frac{d}{dt}(\hat{\rho}_k \phi_k) + (\hat{\rho}_k \phi_k) \hat{\vec{\nabla}} \cdot \hat{\vec{v}} = \frac{\kappa}{v_0 H} \hat{\vec{\nabla}} (\hat{\rho} \hat{\vec{\nabla}} Y_k) \quad (1.52)$$

Un nombre adimensionnel apparaît. Il est l'inverse de :

$$\frac{v_0 H}{\kappa} = \frac{v_0 H}{\nu_k} \cdot \frac{\nu_k}{\kappa} = Re_k \cdot Sc_k \quad (1.53)$$

Il peut être perçu comme un couplage entre le nombre de Reynolds Re_k et le nombre de Schmidt Sc_k attachés à l'espèce k .

1.4.4 Conservation de la quantité de mouvement

Chaque volume de contrôle est soumis aux mêmes forces surfaciques et volumiques que dans le cas monophasique. La différence avec le cas à un constituant est due à la formulation de la pression, dépendante des deux densités et pouvant dégénérer vers le modèle monophasique. Il n'y a pas de condition limite imposée entre les deux phases, et les deux milieux sont régis par la même équation du mouvement :

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = -\frac{\vec{\nabla} p^*}{\rho} + \frac{1}{\rho} \vec{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau} + \vec{f}_{ext} \quad (1.54)$$

La viscosité dynamique μ_k du milieu fluide k , qui détermine l'ampleur de la dissipation visqueuse n'est pas déterminée par une loi de mélange similaire à la pression. Le caractère naturellement multimatériaux de la méthode est utilisé, comme décrit dans la suite. Il permet de travailler sur l'hypothèse d'une viscosité dynamique constante, qui implique une viscosité cinématique ν_k pour le milieu k légèrement variable dans le cadre de l'hypothèse de quasi-incompressibilité. Il faut toutefois figer un choix pour la définition du nombre de Reynolds :

$$\frac{d\hat{\vec{v}}}{dt} = -\frac{\delta}{M^2} \frac{\hat{\vec{\nabla}} p^*}{\hat{\rho}} + \frac{1}{Re} \hat{\Delta} \hat{\vec{v}} + \frac{1}{Fr^2} \vec{e}_0 \quad (1.55)$$

La viscosité utilisée pour le définir peut être celle du milieu équivalent, celle du milieu le plus diffusif ou le moins diffusif. Ce choix sera détaillé en partie III lors de l'étude des courants de densité.

Chapitre 2

Méthode Numérique Smoothed Particle Hydrodynamics

2.1 Introduction : Intérêt de l'approche avec SPH

Le calcul numérique est un outil industriel reconnu, et communément utilisé, mais c'est surtout un sujet de recherche important, dont on connaît les points à améliorer. En mécanique des fluides, la pertinence d'une simulation est liée évidemment à la qualité du modèle qui doit décrire le phénomène, au respect des conditions de mise en oeuvre du calcul (nombre de points de discrétisation, précision machine, seuil de tolérance pour les solveurs) mais surtout à la méthode numérique qui permet de bien résoudre le problème posé.

Dans la majorité des cas, la méthode numérique utilisée est eulérienne car le savoir-faire établi sur le sujet est assez performant et l'efficacité du calcul également. Toutefois, à la limite des connaissances établies sur ce type d'approche, on constate que les difficultés rencontrées sont souvent intrinsèques au modèle eulérien. Confrontées au suivi de mouvements d'interface, ou à des milieux dispersés, les méthodes eulériennes restent performantes si on peut maîtriser l'erreur numérique due au terme convectif $\vec{v} \cdot \vec{\nabla}$. Ce peut être le cas en utilisant des schémas numériques de suivi d'interfaces tel VOF ou en augmentant la discrétisation, ce qui est coûteux.

L'alternative la plus simple est de choisir une méthode numérique qui n'utilise pas de terme de convection. C'est le cas des méthodes lagrangiennes.

"Smoothed Particle Hydrodynamics" propose une approche naturellement multimatériaux et compressible, bien disposée au suivi des mouvements d'interface. Elle est en outre spatialement précise à l'ordre 2, et conservative par construction. Ces deux qualités la rendent suffisamment compétitive pour être comparée aux méthodes eulériennes. Les récents

travaux réalisés en mathématiques appliquées, [5][4][84], ont amélioré la méthode qui avait déjà été remarquée comme robuste et performante pour l'hydrodynamique et la dynamique rapide. On décrit donc dans la suite le formalisme de la méthode, sa validité mathématique et sa mise en oeuvre, pour traiter les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement. Ces équations sont faciles à mettre en oeuvre temporellement puisque projetées dans l'espace, elles se ramènent à des équations différentielles en temps, que l'on résout usuellement à l'aide de schémas conditionnellement stables.

2.2 Formalisme particulaire

2.2.1 Fondement de la méthode

La valeur d'une fonction scalaire f en un point \vec{r} est donnée de façon exacte par le produit de convolution suivant :

$$f(\vec{r}) = \int_{\Omega} f(\vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}') d\vec{r}' \quad (2.1)$$

où on utilise la distribution de Dirac $\delta(\vec{r} - \vec{r}')$ intégrée sur le volume Ω .

Pour les besoins du calcul, la distribution de Dirac est approchée par un noyau $W(\vec{r} - \vec{r}', h)$ dont le support est caractérisé par la longueur h , et vérifiant :

$$\lim_{h \rightarrow 0} W(\vec{r} - \vec{r}', h) = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.2)$$

$$\int_{\Omega} W(\vec{r} - \vec{r}', h) d\vec{r}' = 1 \quad (2.3)$$

Il existe plusieurs noms dans la littérature pour désigner les noyaux qui jouent le rôle de fonctions de convolutions : "kernel", "cut-off" ou simplement spline puisque l'on a recours à ce type de fonction. Si le noyau choisi est à symétrie sphérique :

$$W(\vec{r} - \vec{r}', h) = W(\|\vec{r} - \vec{r}'\|, h) \quad (2.4)$$

Le produit de convolution (2.1) est alors approché avec une précision spatiale d'ordre 2 :

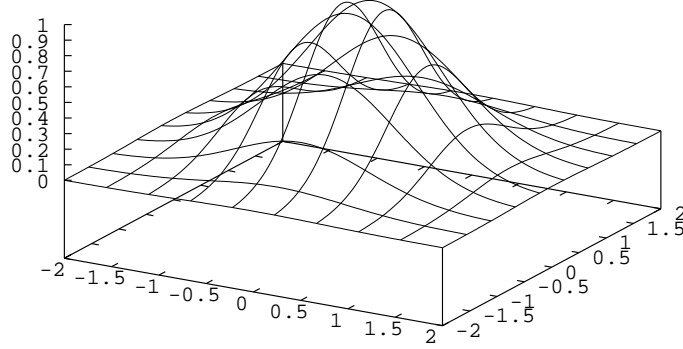
$$f(\vec{r}) = \int_{\Omega} f(\vec{r}') W(\vec{r} - \vec{r}', h) d\vec{r}' + O(h^2) \quad (2.5)$$

2.2.2 Passage à une somme discrète

En utilisant la densité en chaque point $\rho(\vec{r}')$, et en interprétant $\rho(\vec{r}') d\vec{r}'$ comme la masse associée à chaque élément de volume $d\vec{r}'$, l'équation (2.5) s'écrit :

$$f(\vec{r}) = \int_{\Omega} f(\vec{r}') \frac{W(\vec{r} - \vec{r}', h)}{\rho(\vec{r}')} \rho(\vec{r}') d\vec{r}' + O(h^2) \quad (2.6)$$

Noyau Gaussien

FIG. 2.1: Exemple de noyau de convolution $W(\vec{r} - \vec{r}', h)$

Soit i une particule SPH repérée par \vec{r} . Soit $D(i)$ l'ensemble des particules repérées par \vec{r}' . L'ensemble des particules de $D(i)$ représentent la partie du volume Ω centré sur i où le noyau n'est pas nul. La forme continue de l'intégrale peut être remplacée par une somme de Riemann sur toutes les particules présentes dans la zone couverte par le support du noyau :

$$f(\vec{r}) = \sum_{j \in D(i)} \frac{m_j}{\rho_j} f(\vec{r}_j) W(\vec{r} - \vec{r}_j, h) + O(h^2) \quad (2.7)$$

Au second ordre d'approximation, on peut donc assimiler la quantité f à sa valeur approchée $\langle f \rangle$. Dans la pratique, un noyau à support borné est utilisé de façon à restreindre la sommation aux seuls voisins j de la particule i .

On note $f(\vec{r}_j) = f_j$, et on définit le volume de la particule j par :

$$\omega_j = \frac{m_j}{\rho_j} \quad (2.8)$$

alors

$$f(\vec{r}_i) \simeq \langle f(\vec{r}_i) \rangle = \langle f \rangle_i = \sum_{j \in D(i)} \omega_j f_j W(\vec{r}_i - \vec{r}_j, h) \quad (2.9)$$

Recherche des voisins

La détection des voisins peut se faire de plusieurs manières. Dans le cas de simulation impliquant un nombre N de points, le test de voisinage, s'il est purement basé sur le critère de présence sous le rayon de lissage, engendre N^2 opérations.

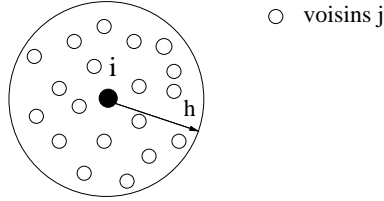


FIG. 2.2: Voisinage d'une particule.

L'utilisation de listes de voisins "link-list" permet d'améliorer les performances de cette méthode en passant à $N \log N$ opérations [52]. Le domaine est quadrillé à chaque pas de temps, suivant un pas d'espace lié à la longueur de lissage h . Les particules sont donc rangées dans des "boîtes". Lors de la remise à jour des listes de voisins, seules les boîtes voisines de la particule sont ouvertes, ce qui permet une optimisation du nombre d'opérations.

Ces phases intermédiaires sont à comptabiliser dans le coût global, mais cette méthode reste plus performante.

Longueur de lissage

Pour un milieu discret donné, la longueur de lissage h est le paramètre qui va déterminer le nombre de voisins sur lequel la sommation va être réalisée. C'est un paramètre dont dépend le coût mais en partie aussi la précision du calcul.

Pour des particules régulièrement espacées (milieu incompressible), h peut être constant, mais pour simuler un phénomène de dynamique rapide (une explosion par exemple), avoir une valeur de h variable indexée sur la densité permet de conserver un nombre de voisins quasiment constant. Une approche simple pour un problème de dimension d consiste à imposer une relation du type :

$$h_i = h_0 \left(\frac{\rho_0}{\rho_i} \right)^{\frac{1}{d}} \quad (2.10)$$

h_0 et ρ_0 sont les valeurs initiales de h et ρ . En couplant à l'équation de continuité, on obtient facilement une équation d'évolution supplémentaire pour h :

$$\frac{dh}{dt} = -\frac{1}{d} \frac{h}{\rho} \frac{d\rho}{dt} = \frac{1}{d} h (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \quad (2.11)$$

2.2.3 Discrétisation de l'opérateur gradient

Dans la suite, on note r_{ij} la norme du vecteur $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$, $\vec{r}_i = (x_i, y_i)$ en deux dimensions. La longueur de lissage h est supposée constante et pour simplifier l'écriture, on omet sa mention dans l'écriture du noyau. Le noyau, à symétrie sphérique, s'écrit alors :

$$W(\vec{r}_i - \vec{r}_j, h) = W(\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|, h) = W(r_{ij}) = W_{ij}$$

Pour développer le calcul, on adopte la notation suivante pour le gradient du noyau :

$$\vec{\nabla}_i W_{ij} = \left(\frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i}, \frac{\partial W_{ij}}{\partial y_i} \right)$$

Puisque le noyau ne dépend que de la distance r_{ij} , on peut écrire :

$$\vec{\nabla}_i W_{ij} = \left(\frac{x_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_i}, \frac{y_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_i} \right) \quad (2.12)$$

soit encore :

$$\vec{\nabla}_i W_{ij} = \frac{\vec{r}_{ij}}{\|r_{ij}\|} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_i}$$

Le schéma particulière pour le gradient de la quantité scalaire f_i s'obtient en dérivant (2.9) :

$$\langle \vec{\nabla} f \rangle_i = \sum_{j \in D(i)} \omega_j f_j \vec{\nabla}_i W_{ij} \quad (2.13)$$

Ce raisonnement peut se justifier au niveau continu en appliquant (2.5) à la fonction $\vec{\nabla} f_i$, puis en réalisant une intégration par partie. L'utilisation de la propriété (2.3) du noyau permet d'obtenir la forme continue désirée.

Mais cette formulation n'assure pas la nullité du gradient si le champ f est constant. En utilisant l'égalité :

$$\rho \vec{\nabla} f = \vec{\nabla}(\rho f) - f \vec{\nabla} \rho$$

et en lui appliquant le principe de discrétisation préalablement exposé, on aboutit à la formulation :

$$\langle \vec{\nabla} f \rangle_i = \frac{1}{\rho_i} \sum_{j \in D(i)} m_j (f_j - f_i) \vec{\nabla}_i W_{ij} \quad (2.14)$$

qui assure, si $f_i = f_j$, $\langle \vec{\nabla} f \rangle_i = \vec{0}$. Ce schéma ne convient pas lorsqu'il est appliqué à l'équation de conservation de la quantité de mouvement, car il n'est pas conservatif.

Une troisième formulation existe pour décrire le gradient, qui assure la conservation de la quantité de mouvement [58]. A partir de l'égalité :

$$\frac{\vec{\nabla} f}{\rho} = \vec{\nabla} \left(\frac{f}{\rho} \right) + \frac{f}{\rho^2} \vec{\nabla} \rho$$

la forme suivante est obtenue :

$$\langle \vec{\nabla} f \rangle_i = \rho_i \sum_{j \in D(i)} m_j \left(\frac{f_j}{\rho_j^2} + \frac{f_i}{\rho_i^2} \right) \vec{\nabla}_i W_{ij} \quad (2.15)$$

A longueur de lissage constante, cette forme respecte le principe d'action-réaction lorsqu'on l'applique à l'évaluation du gradient de pression. La divergence d'une quantité vectorielle $\vec{\Psi}$, peut aussi être obtenue à partir de plusieurs formulations. La dérivation simple de l'opérateur gradient sur chaque direction conduit à :

$$\langle div \vec{\Psi} \rangle_i = \langle \vec{\nabla} \cdot \vec{\Psi} \rangle_i = \frac{1}{\rho_i} \sum_{j \in D(i)} m_j (\vec{\Psi}_j - \vec{\Psi}_i) \cdot \vec{\nabla}_i W_{ij} \quad (2.16)$$

alors que (2.15) donne :

$$\langle div \vec{\Psi} \rangle_i = \rho_i \sum_{j \in D(i)} m_j \left(\frac{\vec{\Psi}_j}{\rho_j^2} + \frac{\vec{\Psi}_i}{\rho_i^2} \right) \vec{\nabla}_i W_{ij} \quad (2.17)$$

Une dernière approche, utilise une forme générale avec un exposant σ sur la densité :

$$\left\langle \frac{\vec{\nabla} f}{\rho} \right\rangle_i = \sum_{j \in D(i)} m_j \left(\frac{f_i}{\rho_i^\sigma \rho_j^{2-\sigma}} + \frac{f_j}{\rho_i^{2-\sigma} \rho_j^\sigma} \right) \vec{\nabla}_i W_{ij} \quad (2.18)$$

Pour $\sigma = 1$, on retrouve la forme proposée par Vila [84], et développée plus loin, pour assurer la convergence de la résolution.

Erreur numérique liée à l'approximation sur le noyau

L'utilisation de noyaux d'ordre faible peut avoir des conséquences sur la simulation. Ces noyaux ont une forme aplatie au centre du support, de sorte qu'ils sont qualifiés de "flat top kernel" en anglais, et proposent ainsi une position d'équilibre.

Sur une distance très petite devant h , le noyau a une valeur quasiment constante, et son gradient est nul. Cela amène à négliger les forces s'exprimant à l'aide d'un gradient, et en particulier la force induite par les différences de pression existant dans l'écoulement.

Pour palier à ce type de problème, on peut jouer sur le transport des particules. Ainsi à chaque pas de temps un positionnement des particules est imposé, sans être dicté par la méthode en recherche d'un équilibre dynamique. C'est la méthode XSPH, décrite plus loin.

Une autre alternative est d'utiliser un noyau spécial pour le calcul des forces issues de gradients. Ce sont les "anti cluster kernel". Leur forme est détaillée en annexe avec d'autres types de noyaux de la littérature.

2.2.4 Consistance de la formule de quadrature

Les relations usuelles de la méthode pour évaluer un champ scalaire ou sa dérivée étant établies, on s'intéresse à leur précision lors de la mise en oeuvre. En effet, la convergence des calculs ne peut être obtenue que si la consistance des schémas $\langle \cdot \rangle$ pour les différents opérateurs est assurée. Pour cela, on utilise une partie des résultats établis par Raviart et Mas-Gallic [55].

Au premier abord, on peut penser que la précision est fortement liée à la forme du noyau de convolution utilisé et à son aptitude à reproduire la distribution de Dirac. Les noyaux choisis auront alors une précision en rapport avec la dimension de leur support d'utilisation. Pour cela, généralement, le noyau retenu est un spline, c'est-à-dire une fonction polynômiale d'ordre 3, 4 ou 5. On constate toutefois que l'ordre de précision n'est pas forcément lié à l'ordre du noyau. Le réglage des paramètres de celui-ci peut compenser un manque de précision intrinsèque à l'approximation de la distribution de Dirac. Pour cela, on décrit le réglage de ces paramètres. Prenons pour noyau de convolution W , un spline :

$$W(\|\vec{r} - \vec{r}'\|, h) = W\left(\frac{\|\vec{r} - \vec{r}'\|}{h}\right) = \frac{C}{h^d} \Theta\left(\frac{\|\vec{r} - \vec{r}'\|}{h}\right) \quad (2.19)$$

Pour tout type de noyau, il faut vérifier l'hypothèse (2.3), et calcule ainsi, analytiquement, la constante C . Ainsi pour le spline cubique, la constante est $C = 10/7\pi$.

Dans un second temps, on peut considérer que la consistance de la formule de quadrature dépend du rapport entre la longueur de lissage h et l'écart initial entre les particules $\|\vec{r}_0\|$, que l'on définit comme $R = h/\|\vec{r}_0\|$. Si on reprend la forme usuelle de quadrature (2.9) en tenant compte du fait que :

$$\omega_j = \left(\frac{h_j}{R}\right)^d$$

et en notant

$$\Theta_{ij} = \Theta\left(\frac{\|\vec{r}_{ij}\|}{h_{ij}}\right)$$

alors on a :

$$f_i = \sum_{j \in D(i)} \left(\frac{h_j}{R}\right)^d f_j \frac{C}{h_{ij}^d} \Theta_{ij} \quad (2.20)$$

Sur distribution régulière, et dans les cas où la longueur de lissage est constante $h_i = h_{ij}$:

$$f_i = \sum_{j \in D(i)} \frac{C}{R^d} f_j \Theta_{ij} \quad (2.21)$$

C'est-à-dire que la formule de quadrature dépend du rapport C/R^d . Ce résultat est obtenu dans un cadre général dans [55]. On les rappelle ici, mais pour plus de détails, le lecteur est renvoyé aux ouvrages des auteurs.

Résultats pour la convergence d'une approximation particulaire.

On considère des noyaux symétriques à support compact tels que $W \in \mathcal{C}^{m+1}$, $m \geq 2$. Ainsi, il existe une constante $C > 0$ dépendant du champ de transport \vec{v} (supposé suffisamment régulier) tel que :

$$\sum_{j \in D(i)} w_j |\vec{\nabla} W_{ij}| \leq \frac{C}{h} \quad (2.22)$$

L'espace de Sobolev $W_{Sob}^{\mu', p'}(\mathbb{R}^d)$ est doté de $|\cdot|$ et $\|\cdot\|$, la semi-norme et la norme associées aux noyaux et espaces considérés.

Pour toute fonction $f \in W_{Sob}^{\mu, p}(\mathbb{R}^d)$, $s \geq 0$, $\mu = \max(r + s, m)$, $r = 1, 2$, $\frac{d}{m} \leq p \leq \infty$ avec $\frac{1}{q} + \frac{1}{p} = 1$.

$$|f - \langle f \rangle|_{s, p, \mathbb{R}^d} \leq C \left(h^r |f|_{r+s, p, \mathbb{R}^d} + \left(1 + \frac{1}{R}\right)^{\frac{d}{q}} \frac{1}{R^m h^s} \|f\|_{m, p, \mathbb{R}^d} \right) \quad (2.23)$$

Dans la suite, on suppose que les paramètres de discrétisation h and $\|\vec{r}_0\|$ tendent vers zéro, de manière à ce que (2.23) donne la convergence (c'est-à-dire que $R \rightarrow \infty$).

Exemple

On se place en deux dimensions, $d = 2$. En utilisant pour discrétiser le noyau un spline cubique $m = 2$. On choisit une précision et une régularité d'ordre 2, soit $r, s = 2$, et une norme $p = \infty$ pour la semi-norme et la norme de Sobolev associée, ce qui implique $q = 1$.

$$|f - \langle f \rangle|_{2, \infty, \mathbb{R}^2} \leq C \left(h^2 |f|_{4, \infty, \mathbb{R}^2} + \left(1 + \frac{1}{R}\right)^2 \frac{1}{R^2 h^2} \|f\|_{2, \infty, \mathbb{R}^2} \right) \quad (2.24)$$

Ce critère $Rh \rightarrow \infty$ est limitant car il implique un grand nombre d'opérations. En effet, quand il est respecté, le domaine Ω occupe tout le domaine physique, et donc l'ensemble $D(i)$ contient toutes les particules du domaine.

Pour y palier, on peut trouver des procédés judicieux qui utilisent les propriétés du résultat (2.23). Si le champ dont on souhaite discrétiser la valeur, ou la dérivée, est une fonction f que l'on peut apparenter à un polynôme $P0$ ou $P1$, on peut trouver des réglages de R , à valeur finie, qui permettent de retrouver $\langle f \rangle$ et $\langle \vec{\nabla} f \rangle$, avec un nombre d'opérations réduit.

Ainsi pour le spline cubique, on constate bien que pour $R \rightarrow \infty$, on a $\langle 1 \rangle \equiv 1$ et $\langle \vec{\nabla} f \rangle \equiv \vec{\nabla} f$, $f \in P1$, mais surtout que ce résultat existe pour $R = 1.2$, Fig.(2.3).

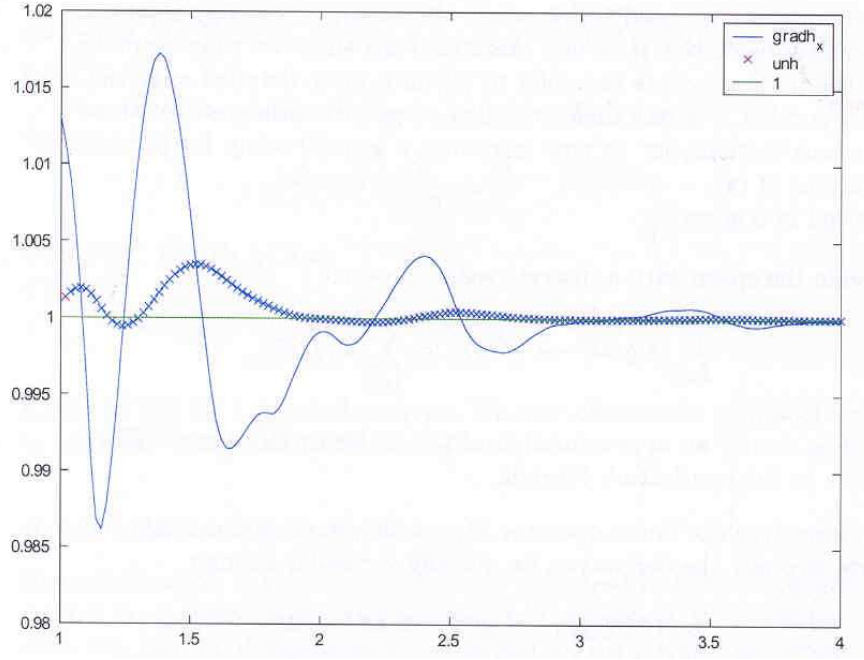


FIG. 2.3: Sensibilité à R de la consistance de la formule de quadrature pour un spline cubique sur une distribution régulière de particules. [85]

Compte-tenu de ces remarques, lorsque l'on travaille avec un noyau à support compact, il est légitime de se demander pourquoi ne pas jouer sur la longueur de lissage h au travers de R plutôt que sur la constante C pour assurer la consistance du schéma. C'est l'idée qui explique le choix de la valeur $R = 1.2$ avec le spline cubique. Cette option n'est pas pleinement satisfaisante, car elle ne résout pas le problème de la consistance sur maillage non régulier.

On lui préfère la mise en oeuvre d'une renormalisation, couplée à l'utilisation d'un nombre de voisin raisonné grâce au choix d'un rapport R optimal.

Ces résultats sont vrais sur espacement de particules régulier. Sur un jeu de particules distribuées non régulièrement, il faut régler autrement la formule de quadrature $\langle \cdot \rangle$ pour vérifier la consistance.

2.2.5 Convergence de la méthode pour les équations de conservation

La formulation des équations aux dérivées partielles (EDP) décrivant les lois de conservation, exigent, pour la résolution, de connaître sous quelles conditions la méthode converge. Le modèle numérique doit fournir des solutions dont on peut majorer l'erreur produite par le calcul. Parmi les formes SPH usuelles pour ces lois de conservation, certaines garantissent la convergence de la méthode.

Soit une loi de conservation scalaire, sous forme conservative, ayant pour opérateur de transport L_v , pour flux $\vec{F}(x, t, f)$ et pour terme source S :

$$L_v(f) + \text{div} \vec{F}(x, t, f) = S \quad (2.25)$$

avec

$$L_v(f) = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{l=1, \dots, d} \frac{\partial(v^l f)}{\partial x^l} \quad (2.26)$$

En utilisant une formulation variationnelle de cette EDP, Ben Moussa, Lanson et Vila, [5] [4] obtiennent une équation intégrale continue équivalente à (2.25). C'est sa formulation faible :

$$\begin{aligned} \forall \varphi \in C_0^2(\Omega \times \mathbb{R}^+) \\ \int_{\Omega \times \mathbb{R}^+} \left(f \cdot L_v^*(\varphi) + \vec{F}(x, t, f) \cdot \vec{\nabla} \varphi + S \cdot \varphi \right) dx \, dt = 0 \end{aligned} \quad (2.27)$$

Cette expression utilise $-L_v^*$ l'opérateur adjoint de L_v :

$$L_v^*(\varphi) = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \sum_{l=1, d} v^l \frac{\partial \varphi}{\partial x^l} \quad (2.28)$$

De plus, en se dotant d'un produit scalaire utilisant la formule de quadrature, chaque terme de (2.27) peut être discrétisé :

$$\int_{\Omega} f \cdot \Psi \, dx \longrightarrow (\varphi, \Psi)_h \equiv \sum_{j \in D(i)} \omega_j f_j \cdot \Psi_j \quad (2.29)$$

Pour les besoins de la convergence, on se munit d'un opérateur discret de dérivation linéaire D_h approchant fortement la dérivée continue \mathcal{D} , tel que pour tout φ suffisamment régulière :

$$\sup \|D_h \varphi - \mathcal{D} \varphi\| \rightarrow 0 \quad \text{si} \quad h \rightarrow 0 \text{ et } \|\vec{r}\| \rightarrow 0 \quad (2.30)$$

On utilise alors le produit scalaire décrit plus haut pour obtenir une forme discrète de l'équation de conservation (2.25). L'opérateur $\vec{\nabla}$, après projection, est approché par D_h , l'opérateur dual de $-D_h^*$:

$$(D_h \varphi, \Psi)_h = -(\varphi, D_h^* \Psi)_h \quad (2.31)$$

$$L_v(f)_h + D_h^* \vec{F}(x, t, f) = S_h \quad (2.32)$$

$L_v(f)_h$ et S_h sont les expressions discrètes de $L_v(f)$ et S . On peut alors établir que f est une solution faible pour la loi de conservation (2.25), au sens de (2.27).

Théorème de Lax-Wendroff pour les méthodes particulières.

Soit $f^0(t) = \sum_{j \in D(i)} f_j(t) \chi_j(x)$ la fonction associée à la suite $(f_j(t))_{j \in D(i)}$ de fonctions régulières de t défini par le schéma (2.32) :

1. pour une fonction f suffisamment régulière : f^0 tend vers f presque partout quand h et $\|\vec{r}\|$ tendent vers 0, avec $\|\vec{r}_0\| \ll h$.
2. si l'opérateur de dérivation D_h est consistant au sens de (2.30).

alors f est solution faible de (2.25).

Il nous reste donc à proposer un schéma pour assurer la consistance forte de l'opérateur gradient adjoint D_h^* . Ainsi, on pourra obtenir des solutions convergées pour les lois de conservation exprimées sous la forme (2.25).

2.2.6 Amélioration par renormalisation

Comme on l'a vu précédemment, il faut que D_h approche fortement \mathcal{D} pour avoir convergence, et ce pour toutes les répartitions de particules. En conservant le noyau de convolution précédemment cité, mais aussi la valeur de R qui permet d'avoir $\langle 1 \rangle \equiv 1$, on va ajouter une condition sur le schéma du gradient pour assurer $\langle \vec{\nabla} f \rangle \equiv \vec{\nabla} f$, $f \in P1$, dans tous les cas de distribution des particules.

Pour modifier la formule de quadrature, on va localement renormaliser l'estimation en multipliant le produit de convolution discret par une constante. En dérivant (2.19) selon :

$$q = \frac{\|\vec{r} - \vec{r}'\|}{h} \quad (2.33)$$

on obtient :

$$W'(q) = \frac{C}{h^{d+1}} \Theta'(q)$$

Soit $\Theta'_{ij} = \Theta'(\frac{\|\vec{r}_{ij}\|}{h_{ij}})$ qui signifie pour le gradient (2.13) :

$$\begin{aligned} \langle \vec{\nabla} f \rangle_i &= \sum_{j \in D(i)} \omega_j f_j \vec{\nabla}_i W_{ij} \\ \langle \vec{\nabla} f \rangle_i &= \sum_{j \in D(i)} \omega_j f_j \frac{C}{h^{d+1}} \Theta'_{ij} \frac{\vec{r}_{ij}}{\|\vec{r}_{ij}\|} \end{aligned}$$

$$\langle \vec{\nabla} f \rangle_i = \sum_{j \in D(i)} f_j \left(\frac{h^d}{R^d} \right) \frac{C}{h^{d+1}} \frac{r_{ij}^{\vec{r}}}{\|r_{ij}^{\vec{r}}\|} \Theta'_{ij}$$

Soit finalement :

$$\langle \vec{\nabla} f \rangle_i = \sum_{j \in D(i)} f_j \frac{C}{h} \frac{r_{ij}^{\vec{r}}}{R^d \|r_{ij}^{\vec{r}}\|} \Theta'_{ij} \quad (2.34)$$

Supposons que f soit un polynôme $P1$, et que l'on soit en une dimension, $f = ax + b$, alors $\nabla f = a$. Pour une distribution de particules quelconque, le schéma SPH (2.34) donnera :

$$\langle \nabla f \rangle = a'$$

et la renormalisation propose d'utiliser la valeur C_{Ren} :

$$\nabla f = C_{Ren} \langle \nabla f \rangle$$

telle que

$$C_{Ren} = \frac{a}{a'}$$

pour corriger l'erreur sur a . On peut aussi réaliser matriciellement cette adaptation du schéma à l'aide de la matrice \mathbf{B} , dite de renormalisation.

Nous allons décrire les résultats des différents auteurs pour obtenir $\langle \vec{\nabla} f \rangle^{Ren} = \vec{\nabla} f$.

Randles Libersky [73]

Johnson et Al. [42] réalisent en 1996 une renormalisation du tenseur des déformations lors d'une étude sur un impact, mais sans l'interpréter de manière tensorielle. Randles & Libersky formalisent cette approche avec un tenseur d'ordre 2 pour le cas 2D. On réécrit l'approximation de f sous la forme :

$$\langle \vec{\nabla} f \rangle_i^{Ren} = \left[\sum_{j \in D(i)} \omega_j (f_j - f_i) \cdot \vec{\nabla}_i W_{ij} \right] : B_i \quad (2.35)$$

Pour retrouver $\langle \vec{\nabla} (ax + b) \rangle^{Ren}$ on veut :

$$a : I = a \left[\sum_{j \in D(i)} \omega_j (x_j - x_i) \cdot \vec{\nabla}_i W_{ij} \right] : B_i$$

soit

$$B_i = \left[\sum_{j \in D(i)} \omega_j (x_j - x_i) \cdot \vec{\nabla}_i W_{ij} \right]^{-1} \quad (2.36)$$

C'est la forme de renormalisation standard.

Bonet [9]

En utilisant une interpolation de Shepard à l'aide de la fonction :

$$\tilde{W}_{ij} = \frac{W_{ij}}{\sum_{j \in D(i)} \omega_j W_{ij}} \quad (2.37)$$

respectant de manière discrète (2.3) :

$$\sum_{j \in D(i)} \omega_j \tilde{W}_{ij} = 1 \quad (2.38)$$

Bonet suppose que

$$\langle \vec{\nabla} f \rangle_j = \sum_{j \in D(i)} \omega_j f_j \tilde{\vec{\nabla}}_i \tilde{W}_{ij}$$

avec

$$\begin{aligned} \tilde{\vec{\nabla}}_i \tilde{W}_{ij} &= \tilde{B}_i \vec{\nabla}_i \tilde{W}_{ij} \\ \tilde{B}_i &= \left[\sum_{j \in D(i)} \omega_j \vec{\nabla}_i \tilde{W}_{ij} x_j \right]^{-1} \end{aligned} \quad (2.39)$$

Vila & al. : Convergence pour R fini [84]

Vila et Lanson ont prouvé que l'utilisation de la renormalisation permettait à la méthode de rester conservative au sens où :

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega} f \, dx \right) = \int_{\Omega} S \, dx \quad (2.40)$$

mais avec, en outre, la possibilité de relaxer la condition de Raviart [55] $R \rightarrow \infty$. La forme de la dérivée renormalisée $\langle \vec{\nabla} \rangle^{Ren}$ de la fonction f_i est :

$$\langle \vec{\nabla} f \rangle_i^{Ren} = \sum_{j \in D(i)} \omega_j (f_j - f_i) B_i \vec{\nabla}_i W_{ij} \quad (2.41)$$

et si on suppose B_i uniformément bornée, alors

$$\| \langle \vec{\nabla} f \rangle_i^{Ren} - \mathcal{D} f_i \| \leq C h_0 \| B_i \| \cdot \| \mathcal{D}^2 f_i \| \quad (2.42)$$

où h_0 est l'échelle caractéristique de lissage. Finalement, la consistance du schéma a lieu pour $h \rightarrow 0$. En outre, on peut montrer que pour R borné et pour une distribution initiale de particules assez régulière, on a stabilité et, si on se ramène à un cas linéaire, convergence [83]. Pour l'opérateur de dérivation adjoint, la forme renormalisée est :

$$\langle \vec{\nabla} f \rangle_i^{Ren*} = \sum_{j \in D(i)} \omega_j (f_j + f_i) B_{ij} \vec{\nabla}_i W_{ij} \quad (2.43)$$

Le nombre d'opérations est donc doublé si on utilise cette forme. Pour réduire celui-ci en gardant la propriété d'opérateur approchant fortement la dérivation continue, on symétrise la matrice de renormalisation :

$$B_{ij} = \frac{(B_i + B_j)}{2} \quad (2.44)$$

où B_i est l'inverse de E_i [5][84]. E_i est la matrice de composantes $E^{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = 1, \dots, d$) pour la particule i de position x .

$$E(x)^{\alpha\beta} = \sum_{j \in D(i)} \omega_j (x_j^\beta - x^\beta) \partial^\alpha W(x, x_j). \quad (2.45)$$

où $\partial^\alpha W$ est tel que : $\vec{\nabla} W = (\partial^\alpha W)_{\alpha=1, \dots, d}$.

Les matrices de renormalisation sont bien conditionnées si leur voisinage satisfait les critères de convergence. Si le conditionnement de la matrice B_{ij} est proche de 0, une solution est d'imposer $B_{ij} = \delta_{ij}$, ce qui équivaut à ne pas renormaliser. Dans le cas d'écoulement à surface libre, ce type de problème peut être rencontré. Les travaux de Doring [24] ont proposé une approche efficace pour traiter la matrice B_{ij} en conséquence.

Dans toute la suite, on notera $A_{x,ij}$ $A_{y,ij}$ les composantes de la projection du noyau renormalisé $B_{ij} \cdot \vec{\nabla}_i W_{ij}$ sur les directions de l'espace 2D.

2.2.7 Lois de conservation avec le formalisme particulaire

En reprenant les résultats de [2.2.5], et en utilisant la forme (2.43) pour respecter la condition de forte approximation du gradient, on va expliciter la forme discrète de la loi de conservation (2.25) pour une particule i .

L'opérateur de transport nécessaire pour (2.32) est :

$$L_v(f)_i = \frac{1}{\omega_i} \frac{d}{dt} (\omega_i f_i) \quad (2.46)$$

Sa forme est proposée par Raviart & Mas-Gallic [55], et sera explicitée plus loin. La quantité $D_h^* \vec{F}$ au point i est :

$$D_h^* \vec{F}_i = \sum_{j \in D(i)} \omega_j (\vec{F}_j + \vec{F}_i) \cdot B_{ij} \vec{\nabla}_i W_{ij} \quad (2.47)$$

\vec{F}_i et \vec{F}_j sont les flux $\vec{F}(x, t, f_i)$ et $\vec{F}(x, t, f_j)$. La forme (2.32) pour i , obtenue précédemment, s'écrit alors :

$$\frac{d}{dt} (\omega_i f_i) + \omega_i \sum_{j \in D(i)} \omega_j (\vec{F}_j + \vec{F}_i) \cdot B_{ij} \vec{\nabla}_i W_{ij} = \omega_i S_i \quad (2.48)$$

Cette expression vérifie bien (2.40). Si on somme (2.48) sur les N particules du domaine discret :

$$\frac{d}{dt} \sum_{1 \leq i \leq N} \omega_i f_i + \underbrace{\sum_{1 \leq i \leq N} \left(\omega_i \sum_{j \in D(i)} \omega_j \left(\vec{F}_i + \vec{F}_j \right) \cdot B_{ij} \vec{\nabla}_i W_{ij} \right)}_0 = \sum_{1 \leq i \leq N} \omega_i S_i$$

C'est-à-dire que les flux intervenant dans le domaine se compensent, et on retrouve la propriété de conservation globale :

$$\frac{d}{dt} \sum_{1 \leq i \leq N} \omega_i f_i = \sum_{1 \leq i \leq N} \omega_i S_i$$

En tenant compte de $\omega_i(t)\rho_i(t) = m_i$, l'équation de conservation de la masse dans le système :

$$\frac{d}{dt} \omega_i \rho_i = 0 \quad (2.49)$$

on peut écrire (2.48) :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{f_i}{\rho_i} \right) = \sum_{j \in D(i)} m_j \left(\frac{\vec{F}_j + \vec{F}_i}{\rho_i \rho_j} \right) \cdot B_{ij} \vec{\nabla}_i W_{ij} = \omega_i S_i \quad (2.50)$$

Cette forme utilise un opérateur pour le gradient qui correspond bien à (2.18) décrit précédemment.

2.2.8 Interprétation de l'équation de continuité comme la conservation du volume

L'équation de continuité (2.51) a été décrite physiquement dans le premier chapitre. Elle résulte d'une expression composée des flux existant dans le volume de contrôle, ces flux devant vérifier la conservation du milieu fluide.

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \quad (2.51)$$

Numériquement, avec le formalisme lagrangien, on procède d'une façon différente, menant au même résultat. La condition de conservation porte alors sur le volume discret ω .

Cette équation exprime la compatibilité entre les coordonnées eulériennes et lagrangiennes, lors d'une opération de dérivation du volume ω par rapport au temps :

$$\frac{d\omega}{dt} = Tr \mathbb{K} \omega_a \quad (2.52)$$

avec \mathbb{K} est le tenseur gradient de vitesse qui associe un vecteur \vec{r}_a de l'espace de configuration initial à un vecteur $\vec{r}(t)$ pour celle de l'instant t :

$$\frac{d\vec{r}(t)}{dt} = \mathbb{K} \vec{r}_a$$

Grâce aux propriétés de \mathbb{K} , de façon évidente on a :

$$Tr \mathbb{K} = \vec{\nabla} \cdot \vec{v}$$

et donc on doit résoudre :

$$\frac{d\omega}{dt} = \omega \operatorname{div} \vec{v} \quad (2.53)$$

Mais, en supposant la masse de la particule constante,

$$m = \omega(t) \rho(t) \quad (2.54)$$

il est possible de l'écrire comme (2.51).

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \quad (2.55)$$

Ainsi, elle s'interprète comme une conservation du volume de contrôle ω le long d'une ligne de courant, au cours du temps.

2.2.9 Conclusion pour le formalisme

La littérature du sujet SPH décrit plusieurs formes d'algorithmes qui permettent la résolution des équations de conservation (2.25) Mais ces formes standards n'assurent pas la convergence vers les bonnes solutions des équations posées au niveau continu. Le problème de fond est, on l'a vu, la position relative des particules après quelques pas de temps et son incidence sur la précision des schémas.

Cette erreur de troncature peut être majorée. En effet, il est connu qu'en prenant un grand nombre de voisins, soit une grande longueur de lissage sur les noyaux, on s'approche de la condition de convergence asymptotique, h infini, qui assure la consistance de tout schéma, sur toute distribution de particules. Cette approche est très coûteuse en opérations ce qui diminue son intérêt.

Pourtant, Monaghan, Morris, parmi d'autres auteurs, utilisent un grand nombre de voisins en augmentant l'ordre du noyau. Avec des splines quintiques, dont la largeur de support (ou R) est bien réglée à l'instant initial, ils prennent en compte plus de particules et réduisent ainsi modérément les problèmes de consistance sur maillage irrégulier. Toutefois, leur approche est coûteuse en opérations et reste conditionnée par R .

Le re-réglage de R pendant le calcul, décrite en [2.2.2] ne permet pas d'en trouver une valeur optimale pour tout voisinage. Cette procédure garantit un nombre voulu de voisins sans influencer sur leur position. Au final, il est plus logique d'ajuster une constante locale, ce que fait la renormalisation, que de chercher à ajuster la longueur de lissage.

Cette renormalisation des schémas est un gage de précision pour la méthode. Le surcoût qu'elle occasionne en terme d'opérations se justifie par la non-consistance du schéma standard sur maillage non régulier. L'approche renormalisée présente un autre atout important : elle modifie le critère de consistance de la méthode et relaxe ainsi une condition contraignante d'utilisation. Elle permet en outre d'obtenir la convergence de la méthode, dans le cas linéaire scalaire, en déterminant la forme discrète de (2.25) qui est nécessaire par une formulation faible. L'écriture de cette formulation est réalisée en se munissant d'un produit scalaire pour l'approximation particulaire et de l'opérateur gradient renormalisé, fortement consistant. Cet opérateur gradient s'obtient indépendamment du noyau de convolution utilisé grâce à la renormalisation des dérivées des noyaux.

La convergence de la méthode est alors démontrée par un théorème analogue à celui de Lax-Wendroff, et s'applique pour toute distribution de particules, régulière ou irrégulière, sous la condition que la distribution initiale des particules, et le champ de transport soient assez réguliers. Ainsi, la convergence ne dépend pas du rapport R , grâce à l'usage de la renormalisation.

2.3 Traitement des conditions limites

C'est là que réside la principale difficulté de SPH. Les calculs classiques d'explosions ou d'impacts ne rencontrent pas ces difficultés car le domaine de calcul ne présente généralement pas de limites physiques. Mais un calcul d'écoulement de fluide visqueux dans une conduite étanche suppose une condition de non-pénétration et d'adhérence. Il existe deux manières d'imposer aux particules SPH les conditions limites : en leur imposant une force les maintenant au-delà du bord ou en usant du formalisme à l'aide de particules fictives qui vont influencer les particules physiques dans leur comportement.

Forces de paroi

L'emploi de forces (répulsives, Lennard Jones, normales) n'est plus très courant. Leur fonctionnement s'explique par une analogie avec la dynamique moléculaire. Ces forces agissent dans un rayon donné, et selon des paramètres assez empiriques, sur les particules du domaine proches des parois. Ainsi la force répulsive s'écrit si $r < r_0$:

$$\vec{f}(r) = D_g \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{p_1} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^{p_2} \right] \frac{\vec{r}}{r^2}$$

p_1, p_2 et D_g sont réglés sur des valeurs empiriques, D_g ayant la dimension d'une vitesse au carré. Nous n'utiliserons pas ces méthodes qui peuvent conduire à des instabilités mais celle décrite maintenant, dite des particules fantômes, qui se rapproche plus du formalisme.

Particules fantômes

C'est une technique assez souple qui peut traiter une condition d'adhérence comme de glissement. Elle reprend l'esprit de SPH qui calcule les quantités physiques sur un voisinage. Ces particules fantômes participent, par leur densité et leur vitesse, à l'écoulement car elles sont détectées comme des voisines physiques.

Pour toute particule physique dont le support associé intercepte une paroi, on crée une particule fantôme, symétrique géométriquement, et de même densité. Pour un point

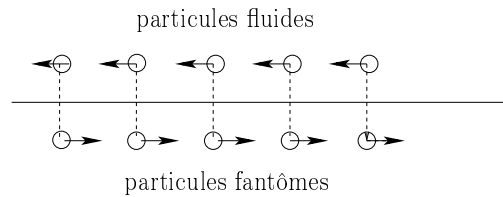


FIG. 2.4: Condition d'adhérence $\vec{v}_{ghost} = -\vec{v}_{ancêtre\ phys.}$

géométrique situé sur la paroi, si la somme sur les voisins prend en compte autant de fantômes que d'ancêtres physiques, et que les particules fantômes ont une vitesse opposée, alors la valeur lissée de la vitesse pour ce point est nulle, $\langle \vec{v} \rangle = \vec{0}$ [80].

De la même façon que l'on a exprimé ici une condition d'adhérence, une condition de glissement peut être imposée :

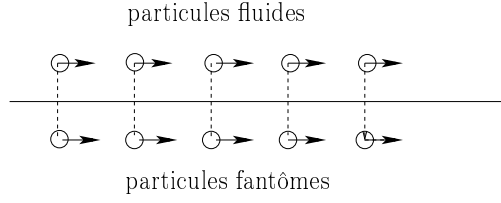


FIG. 2.5: Condition de glissement : $\vec{v}_{ghost} = \vec{v}_{ancêtre\ phys.}$

Les particules fantômes sont construites à chaque pas de temps pour les particules proches des frontières. Il est primordial de les construire sur une “épaisseur” suffisante pour que toute particule physique en bord ait un voisinage aussi dense qu’à l’intérieur du domaine.

Cette technique est mise à mal pour les parois courbes et le traitement de coins, ce qui constitue l’un des aspects les plus limitant de la méthode à l’heure actuelle.

Il est maintenant possible d’établir les approximations particulières convergentes des équations d’un problème continu en mécanique des fluides, décrites dans le chapitre 1, et qui sont rassemblées dans le système :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v} \\ \frac{d\rho}{dt} = -\rho \operatorname{div}\vec{v} \\ \frac{d\vec{v}}{dt} = -\frac{\vec{\nabla}p}{\rho} + \frac{1}{\rho}\operatorname{div}\boldsymbol{\tau} + \vec{f}_{ext}. \end{array} \right. \quad (2.56)$$

Dans un premier temps, on ne décrira que la partie hyperbolique des équations. Puis après une discussion sur les différentes formes de diffusion, on décrira la forme SPH complète de (2.56).

2.4 Schéma numérique pour la partie hyperbolique

2.4.1 Discrétisation de la conservation de la masse

En reprenant les équations du modèle physique continu décrit précédemment, on cherche à intégrer dans le temps l'équation de continuité sous forme lagrangienne :

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v}$$

Ainsi, pour chaque particule i , on résout :

$$\left\langle \frac{d\rho}{dt} \right\rangle_i = -\rho_i \langle \text{div} \vec{v} \rangle_i \quad (2.57)$$

avec pour formulation de $\text{div} \vec{v}$:

$$\langle \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \rangle_i = \sum_{j \in D(i)} \omega_j (\vec{v}_j - \vec{v}_i) \cdot B_{ij} \vec{\nabla}_i W_{ij} \quad (2.58)$$

C'est avec (2.57) que la densité est la plus communément évaluée. Mais, compte tenu du formalisme, on peut aussi utiliser directement (2.9) pour évaluer la densité :

$$\langle \rho \rangle_i = \sum_{j \in D(i)} \omega_j \rho_j W_{ij} = \sum_{j \in D(i)} m_j W_{ij} \quad (2.59)$$

La différence entre les deux formulations se ressent dans les problèmes incluant des surfaces libres.

La forme (2.59) ne permet pas d'assurer une pression constante sur une interface car elle utilise les densités des points détectés dans le voisinage du point i . Lorsque i est au voisinage de la surface libre, le support ne comprend pas de voisins dans la zone qui correspond à l'air et l'intégration du noyau sur ce voisinage ne donne pas 1. L'évaluation de la densité est donc faussée. L'utilisation de la forme (2.57) prémunit de ce type d'erreur.

2.4.2 Discrétisation de la quantité de mouvement

La loi d'état donnée, il est possible d'évaluer la pression connaissant la densité. On peut alors évaluer le gradient de pression et s'intéresser à l'équation de la quantité de mouvement écrite sous forme lagrangienne :

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = -\frac{\vec{\nabla} p}{\rho}$$

Pour calculer le gradient de pression, le choix est à faire entre les différentes formulations du gradient qui ont été citées plus haut. La forme (2.60), issue de la formulation faible pour la loi de conservation, se comporte mieux en présence de gradients de densité [83]. Ainsi nous choisissons :

$$\frac{d\vec{v}_i}{dt} = \sum_{j \in D(i)} m_j \left(\frac{p_i + p_j}{\rho_i \rho_j} \right) B_{ij} \vec{\nabla}_i W_{ij} \quad (2.60)$$

2.4.3 Transport

Le traitement lagrangien du calcul suppose que la position des points de discrétisation du domaine soit mise à jour à chaque pas de temps, suivant leur vecteur vitesse \vec{v} :

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i$$

Le transport lagrangien amène des artéfacts à la mise en oeuvre discrète. Des positions d'équilibre numérique peuvent apparaître entre les particules. Cela s'interprète comme une interpénétration des particules. En effet, puisqu'on assimile les volumes de contrôle à leur centre de masse, ceux-ci étant ponctuels, ils peuvent se coller et simuler une coalescence. S'il est impossible de supprimer ces forces d'attraction numérique, il faut savoir les dimensionner et assurer que leur effet soit négligeable devant celui des forces physiques.

A cet effet, Monaghan [58] a introduit en 1992 une variante de la méthode, dite "XSPH".

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i^{XSPH} \quad (2.61)$$

En utilisant une vitesse lissée pour le transport, la méthode fait évoluer spatialement une particule à une vitesse corrigée, en fonction de celle lissée sur son voisinage :

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i + \epsilon \sum_{j \in D(i)} \frac{2 m_j}{\rho_i + \rho_j} (\vec{v}_j - \vec{v}_i) W_{ij} \quad \text{avec } 0 < \epsilon < 1 \quad (2.62)$$

Ici le domaine discret mis en place à l'instant initial est perturbé numériquement, puis corrigé. Ceci met en évidence une similitude avec les méthodes Euler-Lagrange, (ALE) qui s'explique par le fait que l'on est confronté à des situations où la simulation numérique est difficile à mettre en oeuvre, du fait de la perturbation des maillages.

Pour respecter le bon usage de l'expression (2.53), qui sert d'opérateur de transport, c'est cette vitesse lissée qui doit servir au calcul de la masse lors de la résolution de l'équation de continuité (2.58). Le degré de lissage de la vitesse de transport a donc une incidence sur le calcul du champ de densité.

Cette condition a pour but de conserver la relation entre l'état à l'instant initial et à tout instant t pour un volume de contrôle, ce qui caractérise une méthode lagrangienne.

2.5 Nécessité de modéliser la diffusion

Pour un écoulement visqueux, la dissipation liée au fluide diffuse la condition d'adhérence $\vec{v} = \vec{0}$ dans l'écoulement en créant un gradient de vitesse, ou cisaillement. C'est au travers d'un terme dissipatif, ajouté à la forme (2.60), que cette information est transmise. Le rôle de ce terme dissipatif est important pour rendre compte du phénomène, et sa modélisation numérique, d'ordre deux en dérivation, ne se fait pas de manière évidente.

Physiquement, c'est un gage de stabilité. Il amortit les ondes de grande amplitude dans la mesure où le coefficient de diffusion qui le dimensionne lui permet de se coupler aux phénomènes générateurs d'ondes. Numériquement, il permet de décentrer localement le schéma (2.60), et de supprimer en partie les instabilités liées aux erreurs numériques.

Ce terme dissipatif, $div\tau$, s'apparente pour une forme fréquemment répandue de τ , à un laplacien. Il est délicat à modéliser par le formalisme complet SPH car il implique deux dérivées successives, sensibles aux erreurs numériques.

Plusieurs traitements existent, ils sont décrits dans la suite.

Une remarque générale peut être notée sur le formalisme, qui traite naturellement la modification locale de la viscosité et des contraintes visqueuses dans un cas multiphasique. Aux interfaces, la condition d'adhérence se diffuse dans les milieux dans des proportions données par la viscosité cinématique. Celle-ci est clairement uniforme dans les zones où un constituant domine mais interpréter une viscosité locale équivalente dans les zones de mélange pose une question de validité par rapport au modèle continu.

$$\langle \vec{\nabla} \cdot \tau \rangle_i = \langle div[\mu_i^e (\vec{\nabla} \vec{v} + \vec{\nabla} \vec{v}^T)] \rangle_i \quad (2.63)$$

Pour interpréter le coefficient homogénéisé μ^e , il faut respecter les échelles des couches de cisaillement induites. Le raisonnement relève alors plus de la loi d'échelle et non pas du formalisme. Toutefois, on peut espérer une bonne concordance entre la valeur prédite par SPH dans ces conditions et la valeur macroscopique proposée par une homogénéisation.

2.6 Schéma SPH pour la diffusion numérique

Le premier schéma introduit est inspiré de la forme de VonNeumann-Ritchmyer, qui a pour vocation d'agir numériquement, à l'échelle spatiale et temporelle des instabilités numériques, sans être perceptible physiquement. On l'ajoute simplement dans l'équation de conservation de quantité de mouvement.

$$\frac{d\vec{v}_i}{dt} = \sum_{j \in D(i)} m_j \left(\frac{p_i + p_j}{\rho_i \rho_j} + \Pi_{ij} \right) B_{ij} \vec{\nabla}_i W_{ij} + \vec{g}$$

2.6.1 Expression de la viscosité numérique de pression

C'est un terme de stabilisation des calculs, utilisé pour les méthodes eulériennes, et introduit dans SPH par Monaghan & al. [50] pour éviter l'interpénétration de matière lors du calcul de chocs (par exemple de nuages galactiques).

Désigné par le terme "Artificial Viscosity" (AV) en anglais et noté Π , cette forme avait été proposée par Von-Neumann et Ritchmyer [87] pour traiter les calculs de chocs ou impliquant des discontinuités de vitesse dans les écoulements de fluides parfaits :

$$\begin{cases} \text{si } \text{div } \vec{v} < 0, & \Pi = \beta \rho h^2 (\text{div } \vec{v})^2 - \alpha \rho h c (\text{div } \vec{v}) \\ \text{si } \text{div } \vec{v} > 0, & \Pi = 0 \end{cases} \quad (2.64)$$

Approche continue

La quantité Π a la dimension d'une pression. Cette quantité n'existe que si la particule avec laquelle elle est calculée s'approche au cours du temps ($\text{div } \vec{v} < 0$ suppose $0 < d\rho/dt$), le but initial étant d'éviter l'interpénétration. Soit α le nombre CFL suivant :

$$\alpha = c \frac{dt}{h} \quad (2.65)$$

L'idée est d'ajouter à la particule une surpression pendant le pas de temps considéré :

$$p(\rho) + \Pi(\delta\rho, \delta\rho^2) = p(\rho + \delta\rho)$$

Cette surpression est calculée par la loi d'état grâce à la variation de densité, positive, obtenue par l'équation de la conservation de la masse :

$$p(\rho + \delta\rho) = p(\rho) + \delta\rho \cdot \left(\frac{dp}{d\rho} \right) + \frac{(\delta\rho)^2}{2} \cdot \left(\frac{d^2p}{d\rho^2} \right) + O(\delta\rho)^3$$

La loi d'état étant :

$$p(\rho) = p_0 \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right] \quad (2.66)$$

on peut expliciter les termes différentiels de (2.66) :

$$(I) \left\| \begin{aligned} \frac{dp}{d\rho} &= c^2 \rho^{\gamma-1} \\ \frac{d^2 p}{d\rho^2} &= \frac{(\gamma-1)}{\rho_0} c^2 \rho^{\gamma-2} \end{aligned} \right. \quad (2.67)$$

$$(II) \left\| \begin{aligned} \delta\rho \cdot \left(\frac{dp}{d\rho} \right) &= c^2 \rho^{\gamma-1} \cdot \delta\rho \\ \frac{(\delta\rho)^2}{2} \cdot \left(\frac{d^2 p}{d\rho^2} \right) &= \frac{(\delta\rho)^2}{2} \frac{(\gamma-1)}{\rho_0} c^2 \rho^{\gamma-2} \end{aligned} \right. \quad (2.68)$$

$$(III) \left\| \begin{aligned} \delta\rho &= -\rho \cdot (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) dt = -\rho \cdot (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \cdot \frac{\alpha h}{c} \\ (\delta\rho)^2 &= \rho^2 \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{v} \right)^2 \cdot \frac{\alpha^2 h^2}{c^2} \end{aligned} \right. \quad (2.69)$$

$$(IV) \left\| \begin{aligned} \delta\rho \cdot \left(\frac{dp}{d\rho} \right) &= -c^2 \rho^{\gamma-1} \cdot \rho \cdot (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \cdot \frac{\alpha h}{c} \\ \frac{(\delta\rho)^2}{2} \cdot \left(\frac{d^2 p}{d\rho^2} \right) &= \rho^2 \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{v} \right)^2 \cdot \frac{\alpha^2 h^2}{2c^2} \cdot \frac{(\gamma-1)}{\rho_0} c^2 \rho^{\gamma-2} \end{aligned} \right. \quad (2.70)$$

$$(V) \left\| \begin{aligned} \delta\rho \cdot \left(\frac{dp}{d\rho} \right) &= -\alpha c h \rho^\gamma (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \\ \frac{(\delta\rho)^2}{2} \cdot \left(\frac{d^2 p}{d\rho^2} \right) &= \frac{\alpha^2 (\gamma-1)}{2 \rho_0} h^2 \rho^\gamma \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{v} \right)^2 = \beta h^2 \rho^\gamma \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{v} \right)^2 \end{aligned} \right.$$

Si $\gamma = 1$, la loi d'état de Tait (2.66) dégénère vers $p = \rho c^2$, et $\beta = 0$. Dans le cas général, on retrouve bien avec (V) la forme continue de cette surpression (2.64). On peut maintenant expliciter la dénomination, viscosité numérique de pression, en montrant son caractère dissipatif. Dans les limites incompressibles et sous l'hypothèse h petit, choisissons un ordre de précision en $O(\delta\rho^2)$, c'est-à-dire $\beta\rho h^2(\text{div}\vec{v})^2 \sim 0$.

$$\Pi = -\rho c \alpha h (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \quad (2.71)$$

La surpression Π agit dans le gradient de pression :

$$\vec{\nabla} p = \vec{\nabla} (p_{phys.} + \Pi) = \vec{\nabla} p_{phys.} + \vec{\nabla} \Pi$$

Et si on remarque

$$\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) = \Delta \vec{v} - \vec{\nabla} \wedge (\vec{\nabla} \wedge \vec{v}) \quad (2.72)$$

dans les zones où il n'y a pas de vorticit  , alors :

$$\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \sim \Delta \vec{v}$$

est vraie. $\vec{\nabla}\Pi$ peut   tre interpr  t   comme un terme de dissipation num  rique que l'on peut quantifier. Alors,

$$\vec{\nabla}\Pi \sim \rho c \alpha h \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{v})$$

s'apparente    un laplacien :

$$\left\langle \frac{\vec{\nabla}\Pi}{\rho} \right\rangle \sim c \alpha h \Delta \vec{v} \quad (2.73)$$

On voit bien que le gradient de Π peut se mettre sous la forme d'un terme de diffusion, comme celui pr  sent dans l'  quation de Navier-Stokes. Pour un pas d'espace et un pas de temps donn  , la dissipation peut   tre quantifi  e gr  ce au coefficient $\nu_{num} = c \alpha h$ devant le laplacien, qui a la dimension d'une viscosit   cin  matique [18][50].

$$\left[\frac{\vec{\nabla}\Pi}{\rho} \right] = \left[\nu_{num} \Delta \vec{v} \right]$$

Approche discr  te

Pour faire une discr  tisation par SPH de cette viscosit   artificielle, la premi  re quantit        valuer est une approximation de $h \operatorname{div} \vec{v}$. En effet, la vitesse utilis  e doit   tre celle de transport pour assurer un bon comportement num  rique. L'usage, propos   par Monaghan [56], est de prendre une forme sym  trique, inspir  e des diff  rences finies. Dans la litt  rature SPH, la quantit   $h \operatorname{div} \vec{v}$ est d  sign  e par la notation μ_{ij} :

$$\mu_{ij} = \frac{h_{ij} \vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij}}{\|\vec{r}_{ij}\|^2 + \eta h_{ij}^2} \quad (2.74)$$

$\eta = 10^{-2}$ est un param  tre pour   viter la divergence num  rique si $\|\vec{r}_{ij}\|$ est petit. Ainsi, avec une c  l  rit   et une densit   moyenne $c_{ij} = (c_i + c_j)/2$, $\rho_{ij} = (\rho_i + \rho_j)/2$:

$$\langle \Pi \rangle_{ij} = \beta \rho_{ij} \mu_{ij}^2 - \alpha \rho_{ij} \mu_{ij} c_{ij}$$

Mais par abus d'  criture, les utilisateurs de SPH   crivent Π dans les   quations du mouvement divis   par le carr   de la densit  , pour rendre compte du gradient discret et du caract  re volumique de la force, constat   au niveau continu. On peut le d  signer par Π_v :

$$\Pi_v = \frac{\Pi}{\rho^2}$$

On notera dans la suite $\langle \Pi_v \rangle_{ij} = \Pi_{ij}$.

$$\Pi_{ij} = \frac{\beta \mu_{ij}^2 - \alpha \mu_{ij} c_{ij}}{\rho_{ij}} \quad (2.75)$$

2.6.2 Approche explicite des équations d'Euler avec une diffusion numérique pour la stabilisation

Lors du co-encadrement du stage de Thomas Cabaret [13], des calculs d'écoulements à surfaces libres ont été réalisés en prenant en compte, par exemple, une rupture de barrage. Un volume de fluide à l'équilibre hydrostatique est brusquement libéré et lâché dans un réservoir.

Avant de simuler tout phénomène dynamique, il est nécessaire d'avoir dans le milieu statique une distribution de densité en équilibre. La particule fluide à la hauteur z dans le domaine fluide subit la pression exercée par les particules de la colonne d'eau au-dessus, plus la pression extérieure :

$$p(z) = \rho g z + p_{ext}. \quad (2.76)$$

Lorsque toutes les particules ont pris leur position d'équilibre $\vec{v} = \vec{0}$, compte tenu de la gravité et des conditions limites, la gravité est effectivement compensée par le gradient de pression.

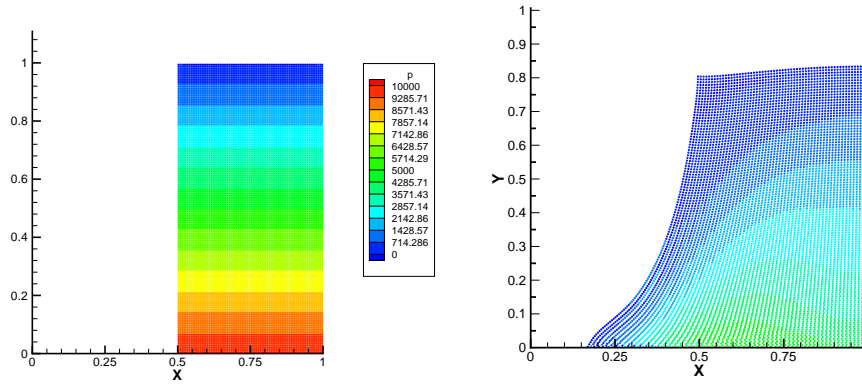


FIG. 2.6: Equilibre hydrostatique avant une rupture de barrage et front à $t=0.2s$

Les équations prises en compte sont celles d'Euler et l'effet stabilisateur de la viscosité de pression a été étudiée pour plusieurs valeurs des paramètres α et β .

$$\frac{d\vec{v}_i}{dt} = \sum_{j \in D(i)} m_j \left(\frac{p_i + p_j}{\rho_i \rho_j} + \Pi_{ij} \right) B_{ij} \vec{\nabla}_i W_{ij} + \vec{g} \quad (2.77)$$

Une étude paramétrique a quantifié ses effets sur les calculs. Au même instant $t = 0.9s$ du calcul, les comportements sont assez différents. Une condition de glissement est considérée aux parois. Pour contrôler le déplacement des particules, un plafond fictif, glissant, est modélisé en $y = 1.2$ pour éviter qu'une particule ne parte à l'infini, et fasse diverger la simulation.

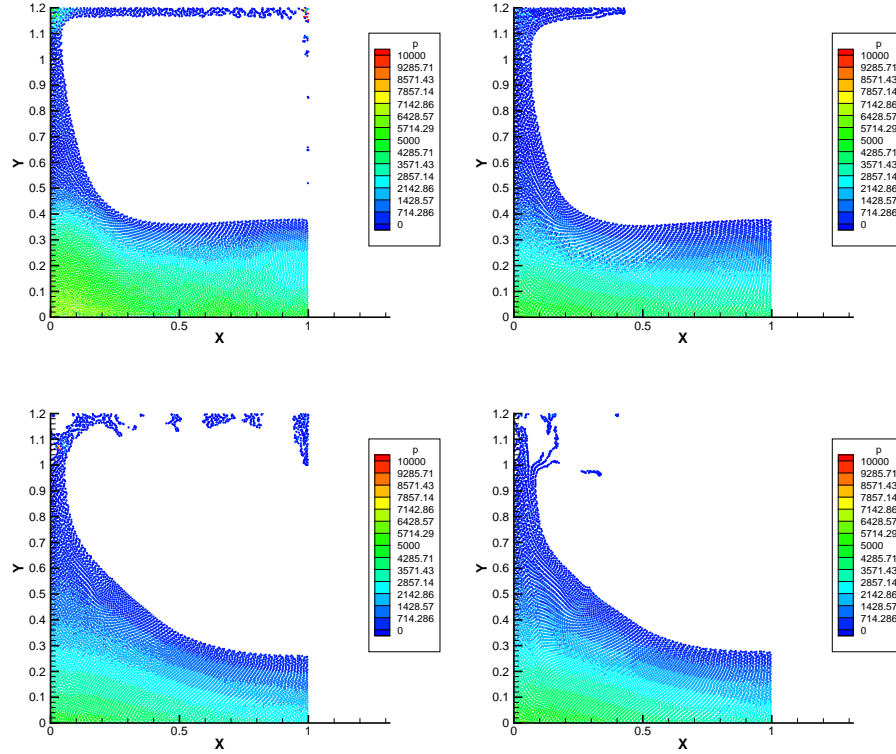


FIG. 2.7: Résultats d'une simulation de rupture de barrage avec les paramètres : $\alpha=0.1$ et $\beta=0$, $\alpha=1$ et $\beta=1$, $\alpha=1$ et $\beta=3$, $\alpha=2$ et $\beta=1$

On remarque que pour les valeurs les plus importantes de α et β , le front de l'écoulement généré par la rupture d'équilibre parcourt une distance nettement moins importante. L'action de la diffusion numérique se couple donc à la physique du problème.

Ainsi pour $\alpha=2$ et $\beta=1$, le front atteint le plafond mais retombe sous l'effet de la gravité, ce qui n'est pas le cas pour $\alpha=0.1$ et $\beta=0$. C'est pourtant cette dernière simulation qui s'approche le plus de l'approximation de fluide parfait. Si on cherche à modéliser le phénomène avec (2.77), la diffusion numérique prend donc un rôle macroscopique pour intervenir dans l'écoulement.

La stabilité produite par le terme Π_{ij} n'est pas garantie pour toutes les valeurs de α et β . Si on conduit les simulations sur des temps plus importants, jusqu'à divergence numérique du calcul, il apparaît que la simulation ($\alpha=0.1$, $\beta=0$) est stable, bien que moins diffusive, sur une période où le cas ($\alpha=1$, $\beta=1$) devient instable.

Toutefois dans les cas où l'on prendra $\alpha \sim 1$, et $\beta = \alpha/2$, on observera toujours une certaine stabilité, mais sans garantir la consistance avec les équations d'un écoulement de fluide parfait.

Commentaire sur le réglage des paramètres

Les paramètres (célérité, nombre CFL, longueur de lissage, pas de discrétisation, α et β de la viscosité de pression numérique) sont fortement couplés entre eux. Par exemple, la viscosité numérique étant liée à h , raffiner la discrétisation en mettant deux fois plus de points change le pas d'espace $\|r_0\| = 1.2h$ et divise par deux l'effet de Π . Elle est donc très non-linéaire.

2.6.3 Conclusion

Lorsque l'on utilise une diffusion numérique du type VonNeumann dans une simulation, l'idéal est d'avoir un maillage assez fin pour capter précisément le cisaillement local, et faire intervenir la pression numérique Π uniquement là où on constate une compression. Une valeur de α trop forte, un maillage trop grossier peuvent engendrer une dissipation dans le phénomène étudié, ce qui n'est pas voulu.

Mais l'usage d'un maillage adapté, avec une valeur de α trop faible, ne permet pas de diffuser via le terme Π à une amplitude effective. Son utilisation est donc à proscrire pour réaliser des simulations précises dans une modélisation d'écoulement de fluide parfait.

2.7 Schémas SPH pour la diffusion physique

Dans le cas où l'on souhaite modéliser toutes les échelles de l'écoulement, ou simplement traiter les équations de Navier-Stokes, l'utilisateur de SPH doit modéliser la divergence du tenseur des contraintes ($div \boldsymbol{\tau}$). Ce terme est assimilable, pour un fluide newtonien, à $\mu \boldsymbol{\Delta} \vec{v}$.

Avec la méthode SPH, suivre le formalisme conduit à dériver deux fois le noyau. C'est-à-dire considérer $\boldsymbol{\Delta} = (\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla})$. Cette approche est décrite dans la littérature par Brookshaw [12] pour la résolution d'une équation de la chaleur, et déconseillée. Même sur une distribution régulière de particules, des instabilités numériques sont constatées, en particulier aux frontières. L'utilisation de noyaux d'ordre faible peut être en cause, surtout dans le cas où la consistance est soumise au nombre de voisins.

Monaghan [58], puis Morris [66] proposent donc en alternative des formes hybrides pour approcher $\vec{grad} (div \vec{v})$. Celles-ci couplent l'utilisation d'une fonction cut-off qui donne une approximation SPH du gradient, et de la divergence de la vitesse sous la forme μ_{ij} (2.74).

Pour comparer leur consistance, on peut tester scalairement leur comportement en calculant le laplacien d'une fonction test polynomiale $u = x^2 y^2$.

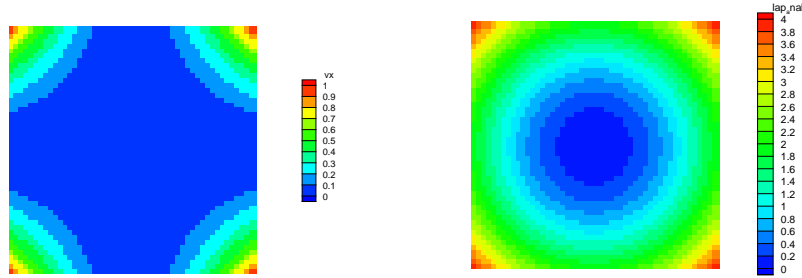


FIG. 2.8: Fonction test $x^2 y^2$ et son laplacien.

Le domaine est carré, 1×1 , et centré sur $(0, 0)$. Les conditions limites sont générées par des particules fantômes sur lesquelles on impose le champ solution, sans chercher à imposer de valeur sur le bord du domaine.

On décrit donc dans la suite les différentes formes à notre disposition. Après quelques tests sur la fonction proposée, un choix pour la formulation de la diffusion dans (2.56) est proposé.

2.7.1 Formes hybrides

Ces formes doivent être réglées à un maillage donné, par une renormalisation dans la configuration initiale. Une constante, propre au laplacien, qui correspond au paramètre $10/7\pi$ dans le spline cubique pour le schéma (2.9), est à calculer pour le laplacien mais sa valeur n'est ni mentionnée ni communiquée dans la littérature.

Monaghan [17] :

$$\nu \Delta \vec{v}_i \simeq \sum_{j \in D(i)} m_j \frac{16\nu}{\rho_i + \rho_j} \frac{\vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij}}{\|\vec{r}_{ij}\|^2 + \eta^2} \vec{\nabla}_i W_{ij} \quad (2.78)$$

En raisonnant comme on l'a fait pour l'étude de la consistance du gradient, on voit que cette forme n'est pas consistante pour toute longueur de lissage :

$$\langle \nu \vec{\Delta} \vec{v} \rangle_i = 16\nu \sum_{j \in D(i)} \frac{m_j}{\rho_i + \rho_j} \frac{\vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij}}{\|\vec{r}_{ij}\|^2 + \eta^2} \frac{C}{h^{d+1}} \frac{\vec{r}_{ij}}{\|\vec{r}_{ij}\|} \Theta'_{ij}$$

En faisant l'hypothèse que $\rho_i = \rho_j$, $\omega_j = \frac{m_j}{\rho_j}$:

$$\langle \nu \vec{\Delta} \vec{v} \rangle_i = 8\nu \sum_{j \in D(i)} \omega_j (\vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij}) \frac{C}{h^{d+1}} \frac{\vec{r}_{ij}}{(\|\vec{r}_{ij}\|^2 + \eta^2)\|\vec{r}_{ij}\|} \Theta'_{ij}$$

donc si on tient compte du fait que $R = h/\|\vec{r}_{ij}\|$ et $\omega_j = \left(\frac{h}{R}\right)^d$, en considérant η très petit :

$$\langle \nu \vec{\Delta} \vec{v} \rangle_i \simeq 8\nu \sum_{j \in D(i)} (\vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij}) \frac{C}{\|\vec{r}_{ij}\| R^{d+1}} \frac{\vec{r}_{ij}}{\|\vec{r}_{ij}\|^3} \Theta'_{ij} \quad (2.79)$$

Pour réaliser analytiquement que ce schéma n'est pas consistant, on peut mener un raisonnement sur une direction de l'espace.

Application pour un laplacien

En deux dimensions, on considère les vecteurs $\vec{v} = u\vec{e}_1 + v\vec{e}_2$ et $\vec{r}_{ij} = d_{xij}\vec{e}_1 + d_{yij}\vec{e}_2$, et après projection selon x et y , on a :

$$\langle \nu \vec{\Delta} \vec{v} \rangle_i \cdot \vec{e}_1 = \langle \nu \Delta u \rangle_i = \nu \sum_{j \in D(i)} \frac{8C}{R^{d+1}} \frac{\Theta'_{ij}}{\|\vec{r}_{ij}\|^4} (u_{ij} d_{xij} + v_{ij} d_{yij}) d_{xij}$$

Dans le cas où la distribution de particules est régulière, on peut poser $d_{xij} = d_{yij} = n\delta_c$, soit $\|\vec{r}_{ij}\|^2 = 2n^2\delta_c^2$

$$\langle \nu \Delta u \rangle_i = \nu \sum_{j \in D(i)} \frac{8C}{R^{d+1}} \frac{\Theta'_{ij}}{\|\vec{r}_{ij}\|^4} (u_{ij} + v_{ij}) \frac{\|\vec{r}_{ij}\|^2}{2}$$

ou encore

$$\langle \nu \Delta u \rangle_i = \nu \sum_{j \in D(i)} \frac{4C}{R^{d+1}} \frac{\Theta'_{ij}}{\|\vec{r}_{ij}\|^2} (u_{ij} + v_{ij})$$

Le schéma n'est pas consistant sur toute distribution à cause du terme v_{ij} qui vient perturber le calcul de la composante u .

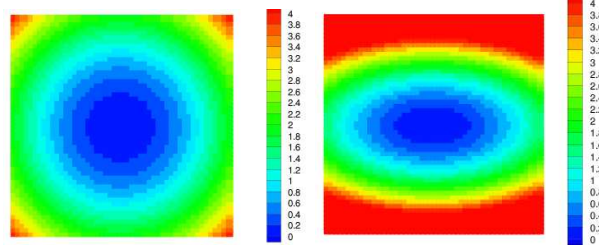


FIG. 2.9: Distribution du laplacien de $u = x^2 y^2$ donnée par la forme analytique et par la forme discrète de Monaghan (2.78).

Morris [66]

En s'inspirant d'une expression SPH modélisant la conduction thermique, Morris propose, avec une viscosité dynamique propre à chaque particule, le modèle suivant pour le terme visqueux :

$$\left\{ \left(\frac{1}{\rho} \vec{\nabla} \cdot \mu \vec{\nabla} \right) \vec{v} \right\}_i = \sum_{j \in D(i)} \frac{m_j (\mu_i + \mu_j) (\vec{r}_{ij} \cdot \vec{\nabla}_i W_{ij})}{\rho_i \rho_j (\|\vec{r}_{ij}\|^2 + \eta^2)} \vec{v}_{ij} \quad (2.80)$$

En faisant l'hypothèse que $\mu_i = \mu_j = \mu$ et en utilisant $\omega_j = \frac{m_j}{\rho_j}$, $\vec{\nabla}_i W_{ij} = \frac{C}{h^{d+1}} \frac{\vec{r}_{ij}}{\|\vec{r}_{ij}\|} \Theta'_{ij}$:

$$\left\{ \left(\frac{1}{\rho} \vec{\nabla} \cdot \mu \vec{\nabla} \right) \vec{v} \right\}_i = \frac{2\mu}{\rho_i} \sum_{j \in D(i)} \omega_j \frac{\vec{r}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij}}{(\|\vec{r}_{ij}\|^2 + \eta^2) \|\vec{r}_{ij}\|} \frac{C}{h^{d+1}} \Theta'_{ij} \vec{v}_{ij}$$

donc si on tient compte du fait que $R = h/\|\vec{r}_{ij}\|$ et $\omega_j = \left(\frac{h}{R}\right)^d$, et en considérant η très petit :

$$\left\{ \left(\frac{1}{\rho} \vec{\nabla} \cdot \mu \vec{\nabla} \right) \vec{v} \right\}_i \simeq \frac{2\mu}{\rho_i} \sum_{j \in D(i)} \frac{C}{R^{d+1}} \frac{\Theta'_{ij}}{\|\vec{r}_{ij}\|^2} \vec{v}_{ij} \quad (2.81)$$

Application pour un laplacien

$$\left\{ \left(\frac{1}{\rho} \vec{\nabla} \cdot \mu \vec{\nabla} \right) \vec{v} \right\}_i \cdot \vec{e}_1 \simeq \frac{2\mu}{\rho_i} \sum_{j \in D(i)} \frac{C}{R^{d+1}} \frac{\Theta'_{ij}}{\|\vec{r}_{ij}\|^2} u_{ij}$$

$$\langle \Delta u \rangle_i = \frac{2C}{R^{d+1}} \sum_{j \in D(i)} \frac{\Theta'_{ij}}{\|\vec{r}_{ij}\|^2} u_{ij}$$

Ce schéma est consistant, mais pour certaines valeurs du rapport C/R^{d+1} . Pour une fonction constante, le cas est trivial. Pour un polynôme $P1$, la symétrie du noyau assure la nullité du laplacien si la distribution de particule est régulière.

Si on veut monter en ordre, par exemple que la fonction test ait une forme du type $ax^2 + by^2 + cxy$, il y a trois coefficients à régler, et un seul degré de liberté, le rapport R . Dans le cas général, il n'est donc pas possible d'assurer la consistance du schéma discret pour l'opérateur $\langle \Delta \rangle$.

L'apport de cette forme par rapport à celle de Monaghan est de projeter les composantes scalaires de \vec{v} sur le noyau, et non pas le vecteur. Le gain en précision sur la disposition initiale est donc sensible.

Dans son article, Morris indique utiliser $R = 1.5$ et un spline d'ordre 5. Ce choix est équivalent, on vient de le montrer, à conserver pour R la valeur adaptée pour les approximations $\langle \cdot \rangle$ et modifier la constante C . Ainsi, en imposant $\langle \Delta u \rangle_i = \Delta u^{an}$ une valeur analytique d'un champ convenu, la valeur C est réglée à C^M pour obtenir le profil convergé :

$$\langle \Delta^M u \rangle_i = \frac{2C^M}{R^{d+1}} \sum_{j \in D(i)} \frac{\Theta'_{ij}}{\|\vec{r}_{ij}\|^2} u_{ij} \equiv \Delta u^{an}$$

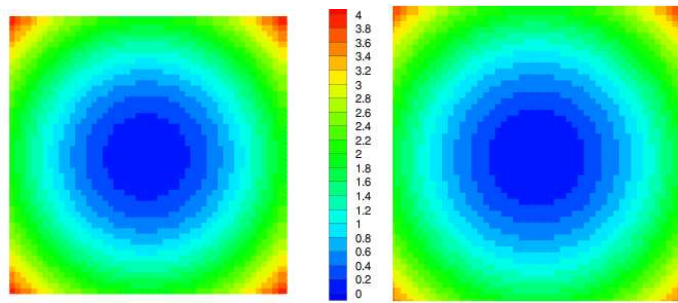


FIG. 2.10: Laplacien Analytique et Morris de x^2y^2

2.7.2 Forme $(\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla})$ renormalisée

Les problèmes liés aux deux dérivations successives du noyau W ont été décrits comme dus à un manque de précision de l'intégration numérique. Cette faiblesse de la méthode standard est résolue avec la forme renormalisée du schéma pour la dérivation, proposée en (2.2.6). Celle-ci apporte plus que de la précision, déjà proposée par Morris, elle la garantit sur toute distribution de particules, ce qui est un atout.

On exprime donc le tenseur des contraintes visqueuses $\boldsymbol{\tau} = \mu(\vec{\nabla}^t \vec{v} + \vec{\nabla} \vec{v})$, avec $\vec{v} = (u, v)$:

$$\boldsymbol{\tau} = \begin{pmatrix} \tau_x & \tau_{xy} \\ \tau_{xy} & \tau_y \end{pmatrix}$$

où les composantes sont simplifiées du fait de l'hypothèse d'incompressibilité :

$$\tau_x = \mu \frac{\partial u}{\partial x}; \quad \tau_y = \mu \frac{\partial v}{\partial y}; \quad \tau_{xy} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)$$

En utilisant (2.16), on obtient pour la composante projetée selon x :

$$\langle div \boldsymbol{\tau} \rangle_i = \sum_{j \in D(i)} \omega_j [(\langle \tau_x \rangle_j - \langle \tau_x \rangle_i) A_{x,ij} + (\langle \tau_{xy} \rangle_j - \langle \tau_{xy} \rangle_i) A_{y,ij}] \quad (2.82)$$

avec

$$\begin{aligned} \langle \tau_x \rangle_i &= \mu_i \sum_{j \in D(i)} \omega_j (v_j - v_i) A_{x,ij} \\ \langle \tau_{xy} \rangle_i &= \mu_i \sum_{j \in D(i)} \omega_j [(v_j - v_i) A_{x,ij} + (u_j - v_i) A_{y,ij}] \end{aligned}$$

L'expression de la contrainte sur la direction y est similaire. Par comparaison aux méthodes hybrides, elle est plus coûteuse en opérations puisque deux descriptions des listes de voisins sont à réaliser pour l'évaluation des deux ordres de dérivation.

Cette formulation semble bien disposée à traiter une condition de surface libre. En effet, le fait de ne pas avoir de voisins pour les particules de surface exprime $\boldsymbol{\tau} \cdot \vec{n} = 0$, soit une condition de Neumann sur la vitesse.

En pratique, son comportement testé sur un écoulement entre deux parois, décrit dans la partie suivante, a donné de bons résultats mais est apparu instable sur un écoulement de surface libre en régime visqueux.

2.7.3 PSER : Formulation type PSE de l'opérateur de diffusion

En s'inspirant du terme PSE (Particle Strength Exchange) utilisé dans les méthodes vortex [19], un nouveau schéma utilisant la renormalisation est proposé, on le désignera PSER.

Le noyau utilisé a la forme :

$$W_{ij} = \frac{\Theta_{ij}}{h_{ij}^d} \quad (2.83)$$

Θ étant un polynôme d'ordre 3 en $\|\vec{r}_{ij}\|/h_{ij}$. Son gradient est :

$$\vec{\nabla} W_{ij} = \frac{\vec{r}_{ij}}{\|\vec{r}_{ij}\|} \cdot \frac{\Theta'_{ij}}{h_{ij}^{d+1}} \quad (2.84)$$

On calcule la valeur C_i du laplacien discret d'un polynôme d'ordre 2 au point i , par exemple $\|\vec{r}_i\|^2$, dont le laplacien vaut 4. Ce coefficient sert localement, pour chaque volume élémentaire porté par i , à écrire la forme discrète de l'opérateur laplacien sur chaque composante du vecteur vitesse.

$$\left\| \begin{aligned} C_i &= \langle \Delta \|\vec{r}\|^2 \rangle_i^{PSER} = \sum_{j \in D(i)} \omega_j (\|\vec{r}_i\|^2 - \|\vec{r}_j\|^2) \cdot \frac{\Theta'_{ij}}{\|\vec{r}_{ij}\| h_{ij}^{d+1}} \\ \langle \Delta \vec{v} \rangle_i^{PSER} &= \sum_{j \in D(i)} \omega_j \vec{v}_{ij} \cdot \frac{4}{C_i} \cdot \frac{\Theta'_{ij}}{\|\vec{r}_{ij}\| h_{ij}^{d+1}} \end{aligned} \right. \quad (2.85)$$

Cette forme PSER s'apparente au schéma de Morris renormalisé pour chaque particule i . Elle n'a pas été établie de suite, mais est plus simple de mise en oeuvre. C'est avec cette forme que l'on réalise la comparaison entre les différents schémas approchant l'opérateur laplacien dans la section qui suit. Initialement, la forme utilisée était :

$$\left\| \begin{aligned} C_i &= \langle \Delta \|\vec{r}\|^2 \rangle_i^{PSER} = \sum_{j \in D(i)} \omega_j (\|\vec{r}_i\|^2 - \|\vec{r}_j\|^2) \cdot \frac{\|\vec{r}_{ij}\|^2}{h_{ij}^{d+1}} \cdot \frac{\Theta'_{ij}}{h_{ij}^{d+1}} \\ \langle \Delta \vec{v} \rangle_i^{PSER} &= \sum_{j \in D(i)} \omega_j \cdot \vec{v}_{ij} \cdot \frac{4}{C_i} \frac{\|\vec{r}_{ij}\|^2}{h_{ij}^{d+1}} \cdot \frac{\Theta'_{ij}}{h_{ij}^{d+1}} \end{aligned} \right. \quad (2.86)$$

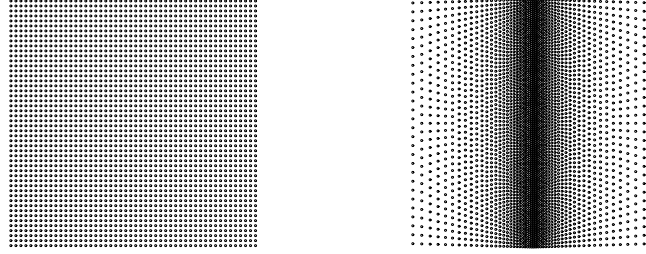
C'est celle qui a servi pour obtenir les résultats de la communication [20].

Pour des polynômes $P0$ et $P1$, les propriétés de consistance s'établissent comme dans la section précédente. Mais pour des polynômes $P2$, le fait de renormaliser sur \vec{r} permet de bénéficier de symétries et d'assurer la consistance dans toutes les directions. En distribution régulière de particules, le schéma peut être consistant pour les termes croisés en bénéficiant du réglage de C_i dans cette configuration.

Dans le cas général, il faudrait régler le schéma avec une matrice. En considérant que les cas incompressibles négligent ce cas de figure, nous nous sommes contentés d'une renormalisation scalaire. Si la constante C_i est considérée constante au cours du calcul, alors le schéma présenté est équivalent à celui de Morris au sens où les constantes C_i et C^M dépendent du même paramètre R . Dans la suite, des réglages de la constante avec ce type de schéma ont été réalisés avec cette constante C_i .

2.7.4 Précision des différents schémas

On teste les formulations pour deux fonctions polynomiales, $u = y^2$ et $u = x^2y^2$, et ce pour deux distributions de particules, régulière (reg.) et irrégulière (irr.).



Pour comparer les schémas, on se place dans le cas $R = 1.2$, et on évalue la norme L^1 de l'erreur sur chaque schéma :

$$\|u - u_h\|_{L_D^1} = \frac{\int_D |u - u_h| d\Omega}{\int_D d\Omega} = \frac{\sum_{j \in D(i)} \omega_j |u_j - u_{h_j}|}{\sum_{j \in D(i)} \omega_j} \quad (2.87)$$

On observe que le schéma PSER constitue le meilleur choix pour faire un compromis entre la précision atteignable sur les deux types de distribution et la symétrie des fonctions étudiées.

Opérateur	Norme L^1 de l'erreur pour y^2 (reg., irr.)	Norme L^1 de l'erreur pour x^2y^2 (reg., irr.)
$\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \cdot)$	0.056/0.0375	0.049/0.075
Monaghan	0.41/0.78	1.352/1.33
Morris	0.061/0.14	0.039/0.079
PSER	$3.14 \cdot 10^{-7}$ /0.18	$2 \cdot 10^{-3}$ /0.07

2.8 Stabilité de l'Equation Différentielle Ordinaire

Le dernier point de la modélisation numérique est la prise en compte de l'évolution temporelle du phénomène. Après projection sur les axes du repère associé, les équations de (2.56) sont traitées comme des équations différentielles ordinaires (EDO) en temps, sur les variables position, densité et vitesse : $U = (\vec{r}, \rho, \vec{v})$.

$$\frac{dU}{dt} = f(U, t) \quad (2.88)$$

On peut supposer que le transport et la conservation de la masse sont stables pour tout pas de temps qui satisfait la stabilité de l'équation de conservation de quantité de mouvement.

Dans cette optique, Lachamp [47] a considéré une condition sur le pas de temps relative à l'équation de continuité. Nos applications peuvent voir cette condition comme moins restrictive que celle donnée par l'équation du mouvement.

Dans celle-ci, δt est choisie telle que l'onde acoustique, visqueuse ou issue des forces volumiques, ne parcourt pas plus d'une longueur de lissage h par pas de temps, ce qui correspond à une distance trop courte pour perturber le voisinage. La vitesse des effets physiques cités précédemment se quantifie grâce aux paramètres sans dimension de l'équation de Navier Stokes. La forme obtenue en [1.3.4] est :

$$\frac{d\hat{v}}{d\hat{t}} = -\frac{\delta c^2}{v_0^2} \frac{\hat{\nabla} \hat{p}}{\hat{\rho}} + \frac{\nu}{v_0 H} \hat{\Delta} \hat{v} + \frac{gH}{v_0^2} \vec{e}_0 \quad (2.89)$$

Pour assurer l'équilibre entre les forces présentes dans l'écoulement, on prend en pratique le pas de temps le plus petit des deux suivants :

1. Les écoulements incompressibles sont ainsi traités avec des lois de milieux compressibles, la pression étant résolue comme une fonction explicite de ρ . En réglant la célérité de manière à approcher l'hypothèse de quasi-incompressibilité, telle que le nombre de Mach soit petit [16], on assure les fluctuations sur la densité δ petites. La célérité doit être importante, proche de la vitesse du son physique. La condition liée sur le pas de temps est appelée condition de Courant, et on veut $\delta t \leq \delta t_{Courant}$:

$$\delta t_{Courant} = \frac{h}{c} \quad (2.90)$$

L'inconvénient de cette condition est qu'elle peut imposer un pas de temps petit, d'usage prohibitif. Il est possible de la relaxer en choisissant d'augmenter la tolérance sur la fluctuation de la densité δ (c'est-à-dire en augmentant le nombre de Mach dans des proportions raisonnables). On diminue ainsi la valeur de c utilisée.

La conséquence pour l'effet acoustique, qui est une perturbation du champ de pression, est de pouvoir se coupler aux basses fréquences, c'est-à-dire aux ondes convectives de vitesse v_0 . On modifie donc en conséquence l'expression de la condition de Courant.

$$\delta t_{acous.} = 0.25 \frac{h}{c + v_0} \quad (2.91)$$

Pour se prémunir d'effets instables liés à une sous-estimation de ces oscillations numériques, un coefficient d'appoint 0.25 sert de "verrou".

Remarque

Ces précautions sur le contrôle de l'évolution de ρ ne mettent pas à l'abri d'instabilités numériques. Le calcul de la vitesse et de ρ simultanément sur les mêmes points génère des instabilités numériques, appelées aussi "modes boîtes à cell". Celles-ci sont d'autant plus fortes que la célérité est forte. Une méthode pour supprimer ces modes est de réaliser un lissage conservatif des valeurs. Le lissage de la pression est fait à intervalles de temps réguliers, en lissant la densité issue de (2.57) qui sert dans (1.17). Le lissage se fait par l'utilisation de fonctions de Shepard :

$$\langle \rho_i \rangle_{liss} = \frac{\sum_{j \in D(i)} \omega_j \rho_j W_{ij}}{\sum_{j \in D(i)} \omega_j W_{ij}} \quad (2.92)$$

2. La deuxième condition s'interprète comme une condition sur le pas de temps visqueux. Elle prévaut lorsque \vec{v} évolue sous l'action prépondérante du terme $\nu \Delta \vec{v}$. Il faut donc $\delta t \leq \delta t_{visq}$ avec :

$$\delta t_{visq} = 0.25 \frac{h^2}{2\nu} = 0.125 \frac{h^2}{\nu} \quad (2.93)$$

Cette condition est suivie pour certaines valeurs de ν , et donne le pas de temps. Si la viscosité présente dans le système est importante, cette condition peut devenir très restrictive et imposer des pas de temps faibles.

Le second membre de (2.88) évalué, le calcul du membre gauche se fait systématiquement dans la littérature de manière explicite. Les schémas les plus courants sont Leapfrog ou Runge Kutta, en oeuvrant pour qu'à chaque pas de temps l'écoulement soit régulé par l'effet dominant : celui du couplage visqueux/acoustique ou un effet non-linéaire.

Conclusion de la première partie

Cette première partie a décrit le modèle physique continu issu de la mécanique des fluides, mais aussi la méthode numérique nécessaire pour le simuler. Ces deux modèles, utilisés judicieusement, en tenant compte des remarques énoncées, permettent de simuler les écoulements visqueux.

La littérature ayant trait à la méthode SPH propose une grande variété de schémas pour les différents opérateurs intervenant dans les équations de la mécanique des fluides, et dont les propriétés effectives sont variées (consistance, stabilité, conservativité..). Afin de finaliser un choix pour le formalisme, il est possible, en utilisant une approche variationnelle des équations du modèle continu, de valider un schéma pour les équations de conservation sous forme linéaire. Cette approche confirme en grande partie les usages pris historiquement dans le champ de SPH.

Dans un cadre plus général, il faut noter que les modèles physiques que l'on souhaite traiter avec SPH ne seront pas nécessairement conservatifs sous forme linéaire mais régis par les équations de Navier-Stokes, rarement résolues avec la méthode SPH. En conservant les résultats obtenus pour la partie hyperbolique des équations, il est possible, par une renormalisation des schémas, d'améliorer le traitement des termes diffusifs, et de proposer un ordre de précision comparable aux termes hyperboliques. Par rapport aux travaux déjà réalisés sur ce champ d'application, dans la littérature de SPH [66], l'objectif est de gagner à la fois en précision, et en efficacité, c'est-à-dire le temps CPU consacré au calcul, évidemment lié au nombre d'opérations-machine.

Avec la renormalisation des schémas, il est possible d'obtenir des améliorations sur ces deux points. Après plusieurs pas de temps, la distribution désordonnée des particules qui résulte du mouvement lagrangien est un facteur d'erreur numérique que l'on peut désormais majorer. De plus, le formalisme renormalisé permet de considérer moins de voisins lors des sommations, et ainsi économiser des opérations pour gagner en efficacité. Par ailleurs, dans le cadre des écoulements visqueux, c'est la marche en temps qui conditionne la rapidité d'exécution, c'est pourquoi on étudiera ses différentes mises en oeuvre.

La seconde partie aspire à réaliser ces possibilités, et à les valider sur des cas tests.

Deuxième partie

Résolution des équations de Navier-Stokes monofluide

Chapitre 3

Simulation d'écoulement à bas nombre de Reynolds

Pour confirmer l'intérêt de la méthode SPH, il est nécessaire de vérifier qu'elle permet de modéliser correctement ces régimes, rencontrés dans les problématiques du domaine pétrolier.

Concernant le choix des schémas particuliers pour discrétiser les équations, les travaux déjà réalisés sur le sujet déconseillent l'utilisation de deux dérivées successives du noyau pour la diffusion [12] [66]. Ce choix serait générateur d'instabilités.

Pour améliorer le formalisme SPH, Cleary [17] puis Morris [66] ont suggéré l'utilisation des formes (2.78) (2.80). La première n'est pas consistante. La seconde l'est avec le réglage préalable convenu. Ainsi, dans le cas test qui sert à valider un écoulement visqueux, l'écoulement de Poiseuille, le schéma de Morris donne de bons résultats.

L'apport de la renormalisation de l'opérateur gradient (2.7.2) est intéressant à tester. Le manque de résolution d'un spline cubique standard, désigné par Brookshaw et Morris [12] [66], comme générateur d'instabilités, serait alors écarté du rang des facteurs de trouble du calcul.

L'étude qui suit a donc pour but de tester les différentes formes de l'opérateur de diffusion à notre disposition (forme Morris (2.80), forme $[\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}]$ renormalisée (2.82), forme PSE renormalisée (2.85)) pour modéliser des écoulements visqueux avec des conditions limites de paroi. Parmi ces formes, une attention particulière est portée aux schémas renormalisés et à leur apport.

3.1 Equations du problème

On rappelle les équations à résoudre, formulées dans le chapitre 1, qui sont celles de transport, de conservation de la masse, et de conservation de quantité de mouvement. Pour une particule i de voisins j :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i^{XSPH} = \vec{v}_i + \epsilon \sum_{j \in D(i)} \frac{2 m_j}{\rho_i + \rho_j} (\vec{v}_j - \vec{v}_i) W_{ij} \quad \text{avec } 0 < \epsilon < 1 \\ \frac{d\rho_i}{dt} = -\rho_i \langle \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \rangle_i \quad \text{avec} \quad \langle \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \rangle_i = \sum_{j \in D(i)} \omega_j (\vec{v}_j - \vec{v}_i) \cdot B_{ij} \vec{\nabla}_i W_{ij} \\ \frac{d\vec{v}_i}{dt} = - \sum_{j \in D(i)} m_j \left(\frac{p_i + p_j}{\rho_i \rho_j} \right) B_{ij} \vec{\nabla}_i W_{ij} + \langle div \boldsymbol{\tau} \rangle_i + \vec{g} \end{array} \right. \quad (3.1)$$

Le système est fermé par la loi d'état (1.17) :

$$p_i(\rho_i) = p_0 + c_0^2(\rho_i - \rho_0)$$

La simulation numérique produite sera validée en vérifiant un écoulement de Poiseuille 2D plan. Cela permettra de tester le traitement des conditions limites, l'effet des formulations de [2.6] pour $div \boldsymbol{\tau}$, et l'approche temporelle, respectueuse de :

$$\delta t = 0.25 min \left[\frac{h}{c + v_0}, \frac{h^2}{2\nu} \right] \quad (3.2)$$

3.2 Ecoulement de Poiseuille 2D plan

3.2.1 Solution analytique

L'écoulement de Poiseuille est un cas académique que l'on retrouve dans la production du secteur pétrolier. Dans une conduite où le régime est supposé laminaire, le mouvement est déclenché par l'action d'un gradient de pression, assimilable à une force volumique $\vec{F} = F \vec{e}_1$ orientée selon l'axe de la conduite.

$$\vec{F} = - \frac{\vec{\nabla} p}{\rho} \quad (3.3)$$

Cette force met en mouvement les particules et est compensée aux parois par les forces de frottement. L'effet de la gravité est négligée dans le phénomène. Il s'ensuit la mise en place d'un profil de vitesse longitudinal axisymétrique, décrivant un maximum de vitesse au centre de la conduite et une condition limite d'adhérence aux bords. Un calcul analytique

permet d'établir que le profil de vitesse est parabolique. En considérant l'équation du mouvement :

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F} + \nu \Delta \vec{v} \quad (3.4)$$

la densité initiale est uniforme. La vitesse longitudinale $u = \vec{e}_1 \cdot \vec{v}$ est supposée invariante en translation, $u(x, y) = u(y)$, et la vitesse transverse v est nulle. Il ne reste à résoudre qu'une composante scalaire de (3.4) :

$$u_{,t} = \vec{F} \cdot \vec{e}_1 + \nu u_{,yy} \quad (3.5)$$

Le débit est associé à la hauteur H de la conduite. Les conditions limites $u(0) = u(H) = 0$ associées à (3.5) permettent d'obtenir le profil de vitesse longitudinal analytique du régime établi :

$$u(y) = \frac{F}{2\nu} y(H - y)$$

Une formulation en série donne le caractère instationnaire de l'écoulement :

$$u(y, t) = \frac{F}{2\nu} y(H - y) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4FH^2}{\nu\pi^3(2n+1)^3} \sin\left(\frac{y\pi}{H}(2n+1)\right) \exp\left(-\frac{(2n+1)^2\pi^2\nu}{H^2}t\right)$$

Le maximum u_m du champ de vitesse se situe au centre de l'écoulement, lieu le plus éloigné de la condition d'adhérence, en $y = H/2$.

$$u_m = \frac{F}{8\nu} H^2 \quad (3.6)$$

Cette vitesse constituera la vitesse référence nécessaire pour calculer le nombre de Reynolds défini en [1.3.4].

$$Re = \frac{FH^3}{8\nu^2}$$

3.2.2 Simulation instationnaire d'un écoulement

Chacune des équations de (3.1) est considérée comme une EDO que l'on résout avec un schéma d'ordre 2, Runge-Kutta modifié, le schéma de Heun [29] :

$$\left\| \begin{aligned} U^{n+\frac{1}{2}} &= U^n + \delta t \cdot f(U^n) \\ U^{n+1} &= \frac{1}{2} \left[U^n + U^{n+\frac{1}{2}} + \delta t \cdot f(U^{n+\frac{1}{2}}) \right] \\ &= U^n + \frac{\delta t}{2} \left[f(U^n) + f(U^{n+\frac{1}{2}}) \right] \end{aligned} \right\|$$

quand le schéma de Runge-Kutta classique donne :

$$\begin{cases} U^{n+\frac{1}{2}} = U^n + \frac{\delta t}{2} \cdot f(U^n) \\ U^{n+1} = U^n + \delta t \cdot f(U^{n+\frac{1}{2}}) \end{cases}$$

Sa stabilité est liée au choix de δt qui doit vérifier les conditions énoncées plus haut.

3.2.3 Condition aux limites

Les conditions limites utilisent les particules fantômes dans la suite pour traiter le cas considéré. La condition d'adhérence, décrite en (2.3), est aisée à mettre en place mais les conditions d'entrée-sortie sont plus complexes. Le formalisme ne permet pas d'imposer simplement des conditions de pression en entrée et en sortie mais permet plus simplement d'utiliser l'invariance en translation du problème, et ainsi de limiter la taille du domaine de calcul, grâce à des conditions de périodicité.

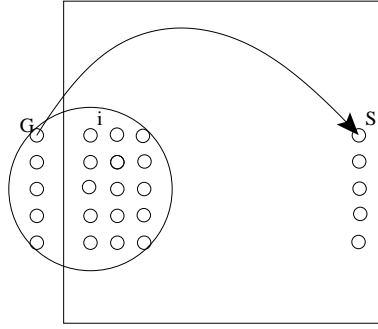


FIG. 3.1: Condition de périodicité du domaine

En entrée-sortie, les algorithmes de détection des voisins prennent en compte les particules physiques proches de $x = 0$ et $x = L$ mais aussi des particules fantômes, qui sont voisins géométriques, mais représentent les particules qui vont respectivement, sortir et entrer dans le domaine.

Dans l'exemple (3.2.3), le ghost G a été généré comme un clone de la particule S qui s'apprête à sortir. G et S sont en tout point semblables, hormis leur abscisse, séparées de L , la longueur du domaine. La particule SPH i subit l'influence de ses voisins, dont G , d'une manière équivalente à celles placées au centre du domaine.

Ces particules doivent être construites également dans les coins pour assurer un voisinage au calcul des particules SPH placées dans les arêtes du domaine.

3.2.4 Conditions initiales

Les calculs ont été réalisés avec une implémentation des particules initialement au repos, disposées sur une grille régulière couvrant le domaine. Le domaine est carré, de côté $H = 1m$ avec 40 particules en hauteur pour tous les schémas, soit $\|\vec{r}_0\| = 2.5.10^{-2}m$.

Toutes les particules i ont une densité $\rho_i = 1000kg.m^{-3}$ et une viscosité dynamique μ_i . On définit ainsi la viscosité cinématique $\nu_i = \frac{\mu_i}{\rho_i}$ à partir du nombre de Reynolds. Par exemple, pour travailler au régime défini par $Re = 1$, on prend $\mu = 1000 Pa.s$, soit $\nu = 1m^2.s^{-1}$.

3.2.5 Paramètres numériques

1. Tous les résultats ont été obtenus avec un calcul de dérivées renormalisées pour le gradient de pression avec $R = 1.2$.
2. Le nombre CFL acoustique est pris à 0.5 pour tous les cas, c'est à dire que l'on impose :

$$\delta t = \frac{0.5h}{c}$$

3. Le choix d'une vitesse du son numérique va permettre d'améliorer le pas de temps en contrôlant les effets induits [2.8]. Monaghan recommande d'utiliser 0.1 comme valeur du nombre de Mach [56]. La valeur de c est ainsi prédite par l'amplitude de vitesse u_m que l'on connaît grâce à la formule analytique du champ de vitesse :

$$M = 0.1 \Leftrightarrow c = 10 u_m$$

soit, avec les paramètres décrits plus haut, une célérité :

$$c = \frac{10FH^2}{8\nu}m.s^{-1}$$

3.2.6 Interprétation des résultats

L'écoulement est invariant en translation selon la direction de \vec{e}_1 . L'interprétation des résultats doit se faire en observant l'évolution temporelle du profil de vitesse pour une abscisse donnée du domaine. Le problème est que l'on ne peut pas raisonner comme pour un calcul réalisé sur une grille, en observant le jeu de volume de contrôle initialement en $x = 0.5$ au cours du temps. Ce jeu de marqueurs, mobile en lagrangien, n'est plus aligné après quelques itérations.

Donc, deux possibilités sont à prendre en compte pour observer le profil de vitesse :

- Soit on définit un profil de points géométriques sur lequel on réalise une approximation du champ de vitesse selon (2.9). Cette option est la plus répandue dans la littérature mais elle masque le caractère éventuellement bruité des résultats fournis par la simulation.
- Soit on définit une zone géométrique rectangulaire de largeur h , dont un axe de symétrie est $x = 0.5$, sur laquelle on détecte, à chaque pas d'écriture, les particules en transit. On affiche alors leur vitesse et leur ordonnée.

3.3 Résultats avec une approche explicite de la contrainte visqueuse $div \tau$

3.3.1 Cas $Re = 10^{-2}$

Pour obtenir ce régime, on impose une force volumique horizontale $F = 8m.s^{-2}$. La viscosité dynamique du milieu est $\mu = 100000 Pa.s$, alors $\nu = 100 m^2.s^{-1}$, ce qui correspond à 10^8 fois la viscosité cinématique de l'eau à $20^\circ C$. Par conséquent :

$$\left\| \begin{array}{l} u_m = 0.01m.s^{-1} \\ c = 0.1m.s^{-1} \end{array} \right.$$

Forme $(\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla})$ Renormalisée

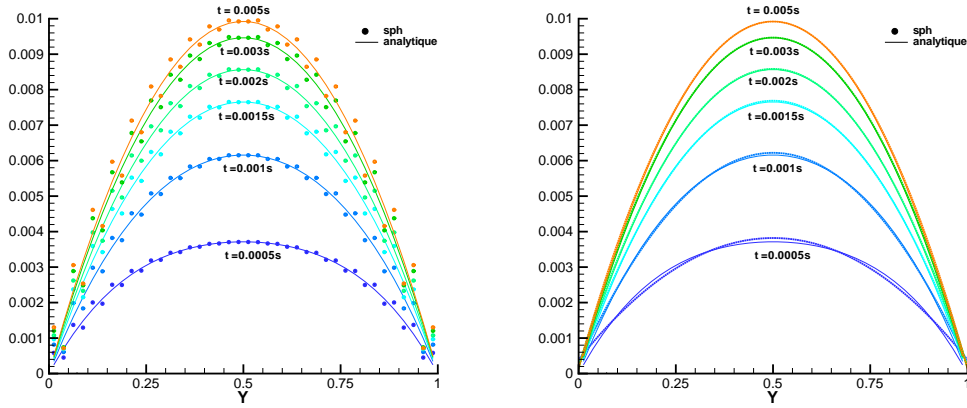


FIG. 3.2: Ecoulement à $Re = 10^{-2}$ $(\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla})$, forme renormalisée, profil "brut" et "lissé" par interpolation polynômiale.

La forme utilisée permet d'obtenir un profil en accord avec celui prédit par le calcul analytique. Toutefois le profil obtenu est légèrement bruité s'il est exploité sans moyenne spatiale. Avec un lissage du champ de vitesse sur un profil, l'accord avec la solution analytique est correct.

L'introduction de lissage de la pression ne résout pas cet artefact. En outre, ce bruit est sensible à l'amplitude de la vitesse présente dans l'écoulement (voir le cas $Re = 1$).

3.3.2 Cas $Re = 1$

Pour obtenir ce régime, on impose une force volumique horizontale $F = 8m.s^{-2}$. La viscosité dynamique du milieu est $\mu = 1000 Pa.s$, alors $\nu = 1m^2.s^{-1}$. Par conséquent :

$$\left\| \begin{array}{l} u_m = 1m.s^{-1} \\ c = 10m.s^{-1} \end{array} \right.$$

Forme $(\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla})$ renormalisée

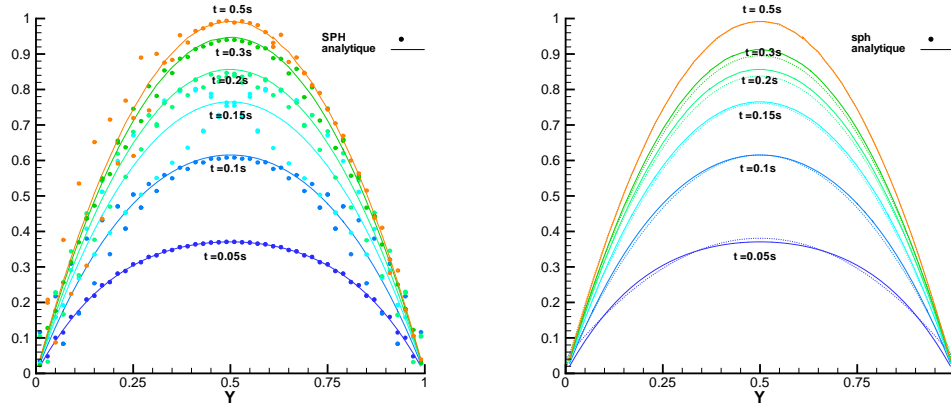
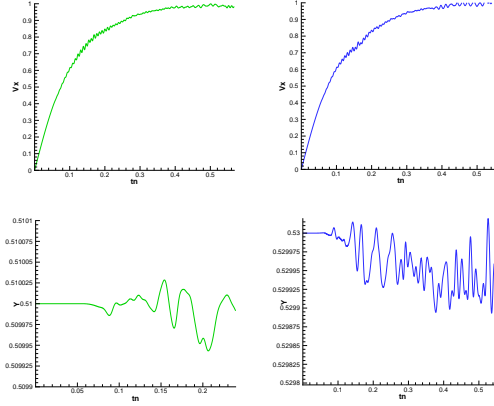
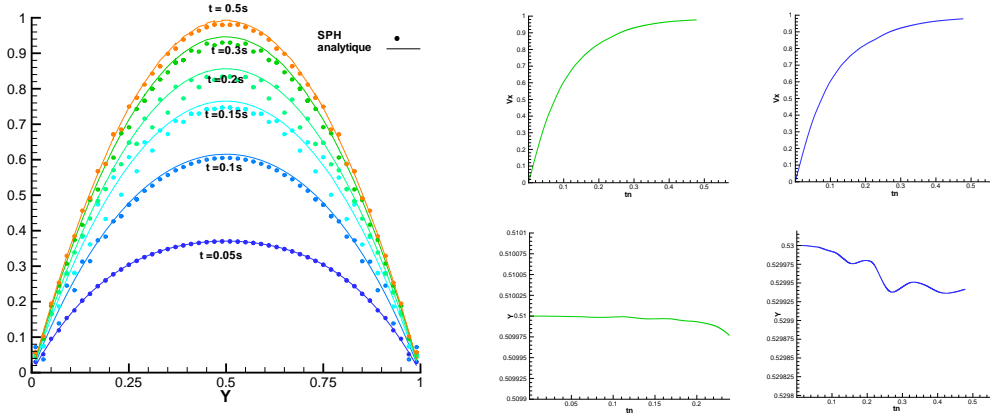


FIG. 3.3: Ecoulement à $Re = 1$ $(\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla})$, forme renormalisée

Comme pour $Re = 0.01$, le profil est bruité. On observe une oscillation des particules autour du profil moyen. Deux particules situées initialement en $y = 0.51$ et $y = 0.53$ sont suivies dans le temps, on observe leurs trajectoires :

FIG. 3.4: Oscillation de la position des particules $Re = 1$

Pour dissiper ce bruit, il a fallu ajouter de la viscosité numérique (2.75) avec $\alpha = 0.8$ et $\beta = 0$.

FIG. 3.5: Ecoulement à $Re = 1$, forme $(\vec{V} \cdot \vec{V})$ renormalisée avec usage de diffusion Π

Ainsi, la viscosité numérique propose une stabilisation des perturbations numériques existant dans la simulation. Il serait intéressant d'observer quel est son comportement pour décrire le cisaillement complet intervenant dans le phénomène.

Calcul avec une viscosité numérique

Grâce à son comportement dissipatif, la viscosité de pression Π_{ij} peut agir comme une contrainte visqueuse. On l'utilise comme un terme de diffusion physique dans l'équation de quantité de mouvement :

$$\frac{d\vec{v}_i}{dt} = \sum_{j \in D(i)} \omega_j \left(\frac{p_i + p_j}{\rho_i \rho_j} \right) B_{ij} \vec{\nabla}_i W_{ij} + \sum_{j \in D(i)} m_j \Pi_{ij} \vec{\nabla}_i W_{ij}$$

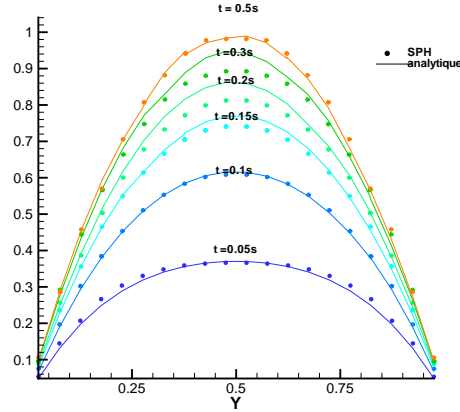


FIG. 3.6: Effet de la Viscosité de Pression Π AV

Ce terme n'est toutefois pas linéaire en espace. A réglage de α donné, si on double le nombre de points, on ne retrouve pas les résultats de convergence montrés plus haut.

3.4 Apport de la renormalisation

Le calcul de deux dérivées successives pour le terme visqueux introduit des instabilités locales de faible amplitude sans incidence sur le phénomène, et pouvant être dissipées par l'ajout d'une viscosité de Von-Neumann.

Toutefois cette approche renormalisée du formalisme reste l'approche consistante la plus fidèle aux opérateurs gradient et laplacien. L'étude qui suit va étudier la sensibilité de la résolution à la distribution des particules, au rayon de lissage (au travers de la valeur de R), et à l'utilisation de la renormalisation de l'opérateur de dérivation.

Maillage initial régulier

L'erreur est quantifiée au travers de deux quantités :

- l'erreur absolue sur la vitesse longitudinale, norme L^2 ;

$$\|u - u_h\|_{L^2}^D = \left(\int_D \|u - u_h\| d\Omega \right)^2 = \left(\sum_{j \in D(i)} \omega_j \|u_j - u_{h,j}\| \right)^2 \quad (3.7)$$

- le rapport instantané entre la vitesse maximale de l'écoulement donnée numériquement et celle donnée par l'analytique.

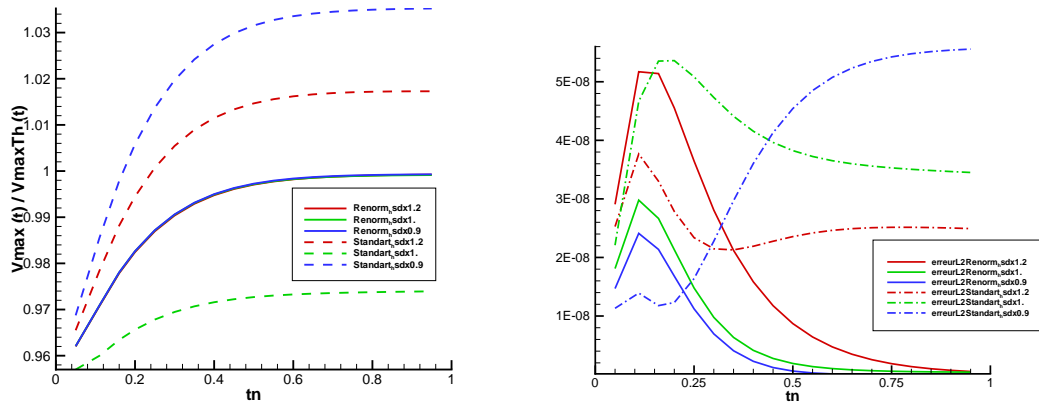


FIG. 3.7: Rapport $V_{SPH}/V_{ANALYTIQUE}$ et norme L^2 de l'erreur pour la vitesse, "grille" initiale régulière.

On constate que le schéma renormalisé (ligne continue) converge pour toutes les valeurs de R alors que le schéma standard (pointillé) ne converge que pour la valeur remarquable $R = 1.2$.

Maillage initial irrégulier

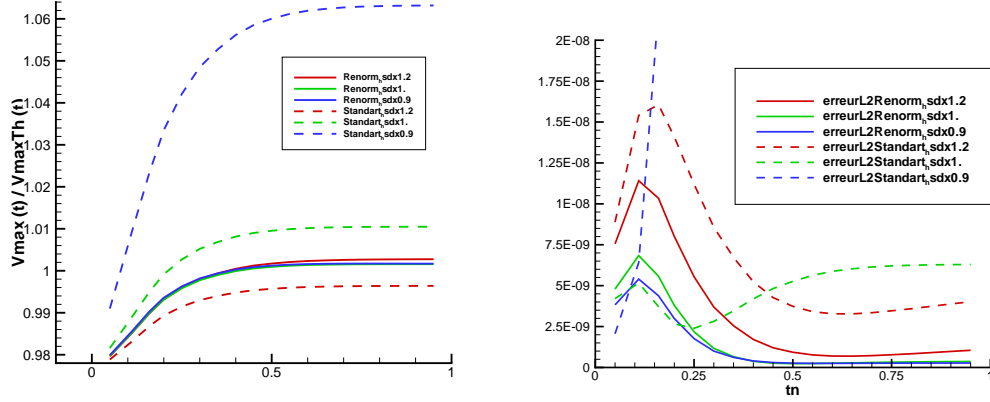


FIG. 3.8: Rapport $V_{SPH}/V_{ANALYTIQUE}$ et norme L^2 de l'erreur pour la vitesse, "grille" initiale raffinée.

On constate encore que seul le schéma renormalisé (ligne continue) converge pour toutes les valeurs de R . L'utilisation de dérivées renormalisées s'avère donc essentielle pour converger sur des maillages dispersés.

3.5 Critère de stabilité temporelle

Le coût calcul va principalement être imposé par la résolution de l'EDO en temps. En reprenant les conditions énoncées en [2.8], on va chercher à évaluer ce coût en fonction du régime étudié. Pour tous les régimes d'écoulements, on a une condition acoustique indiquée par :

$$CFL_a = \frac{c\delta t_a}{h} \quad (3.8)$$

et pour la diffusion visqueuse, un nombre équivalent au CFL_a , et que l'on appelle par abus de langage CFL visqueux, CFL_v :

$$CFL_v = \frac{\nu\delta t}{h^2} \quad (3.9)$$

A la mise en oeuvre, il faut envisager les choses différemment. En imposant un nombre CFL global, il en résulte pour CFL_a et CFL_v , deux pas de temps δt_a et δt_v . Mais puisque la condition s'applique aux deux valeurs :

$$\frac{CFL_a}{CFL_v} = 1 = \frac{c}{\nu} \frac{h\delta t_a}{\delta t_v} \quad (3.10)$$

On choisit donc le plus petit des deux. Pour quantifier le coût de cette condition de stabilité, on peut évaluer le rapport des pas temps résultants :

$$\frac{\delta t_v}{\delta t_a} = \frac{c h}{\nu}$$

Tout dépend de la valeur de $\frac{c h}{\nu}$:

- proche de 1, les deux pas de temps sont équivalents ;
- petit devant 1, le pas de temps choisi est “visqueux” et très faible devant le pas de temps acoustique ;
- grand devant 1, le pas de temps choisi est “acoustique” et la condition diffusive n’est pas restrictive.

C’est cette quantité qui indique le coût de la condition la plus restrictive. On reprend donc à cet effet les deux régimes étudiés précédemment :

Exemple 1 : $Re = 1$

Si Re est obtenu avec $\nu = 1m^2.s^{-1}$, et $c = 10m.s^{-1}$, l’échelle d’espace étant donnée par $h = \frac{1.2}{40} = 0.03m$, (40 points sur la hauteur H) on a :

$$\delta t_v = 0.3 \delta t_a$$

Les pas de temps sont d’un ordre équivalent mais c’est la condition visqueuse qui est restrictive. Pour ce cas, travailler sous la seule condition acoustique diviserait par trois le nombre d’itérations.

Exemple 2 : $Re = 0.01$

Si Re est obtenu avec $\nu = 100m^2.s^{-1}$, et $c = 0.1m.s^{-1}$, l’échelle d’espace étant $h = 0.03m$ on a :

$$\delta t_v = 3.10^{-5} \delta t_a$$

Pour ce cas le gain serait 30000 fois supérieur si on travaillait avec le pas de temps δt_a .

Dans ces conditions, il faut relaxer la condition de stabilité temporelle en considérant l’équation de conservation de quantité de mouvement comme un système linéaire sur la vitesse. Le problème instationnaire impose des pas de temps assez petits pour que la matrice soit à diagonale dominante, grâce à la dérivée en temps sur la vitesse. Le système linéaire sera donc proche d’une matrice diagonale de la forme :

$$A u^{n+1} \simeq I u^{n+1} = B^n \quad (3.11)$$

3.6 Conclusion

Précision du schéma spatial

La simulation d'écoulement à bas nombre de Reynolds gagne à être faite avec des schémas renormalisés, gages de consistance. Ce résultat est clair lorsque l'on compare les résultats obtenus sur distribution raffinée et régulière. Cette étude nous montre en outre que l'on peut réaliser des simulations en utilisant un nombre de voisins réduits sans perdre en précision.

Schéma en temps

La simplicité de mise en oeuvre d'une méthode explicite trouve ses limites dans son efficacité. En régime dissipatif, cette approche est coûteuse, et limite en conséquence l'ordre de la discrétisation. On développe donc dans la suite une modélisation numérique implicite de la contrainte $\operatorname{div} \boldsymbol{\tau}$.

Chapitre 4

Approche implicite de la contrainte visqueuse $\operatorname{div} \tau$

4.1 Introduction

La résolution des équations de (3.1) se fait classiquement dans le formalisme SPH par une estimation explicite. Mais quelques calculs de ces phénomènes instationnaires par implication temporelle sont connus à ce jour.

Pour réaliser le calcul d'un nuage de poussière, Monaghan [60] propose que le milieu soit considéré comme multimatériaux, constitué de particules d'air et de poussière. Un couplage existe entre les deux milieux, qui s'exprime au travers d'un terme de trainée dépendant des vitesses des deux constituants. Pour évaluer ce terme, une approche explicite est mal adaptée sauf à des pas de temps prohibitifs. L'auteur utilise alors le modèle physique qui décrit le couplage présent dans le phénomène pour exprimer la trainée de chaque constituant comme dépendante de sa propre vitesse. Ainsi l'approche est implicite. Elle ne nécessite pas d'inversion de système linéaire, car le modèle ne considère que des interactions de deux particules, et simplifie ainsi grandement le problème.

Dans le but de calculer des écoulements avec un champ de pression non barotrope, Cummins [22], en utilisant une méthode de projection, simule un écoulement incompressible newtonien en résolvant un système linéaire associé à une équation de Poisson sur la pression. L'opérateur laplacien associé est le terme de Monaghan (2.78).

Dans le cas du calcul d'un écoulement très visqueux, les critères de convergence du calcul sont la finesse de la discrétisation et la valeur du pas de temps. Ce sont aussi des facteurs de coût-calcul importants dont on a souhaité se libérer. La méthode étant d'ordre 2 en espace, le niveau de la résolution spatiale ne peut pas être altéré sans dégrader la qualité des résultats. C'est donc la condition de stabilité visqueuse existant dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement, liée à la prépondérance de $\operatorname{div} \tau$, que l'on va

chercher à écarter en réalisant un calcul implicite de $\text{div } \tau$.

Dans le cas d'un fluide newtonien, cette contrainte visqueuse dépend linéairement de \vec{v} :

$$\text{div } \tau = \nu \Delta \vec{v}. \quad (4.1)$$

Il est possible de considérer ce terme au temps $t + \delta t$ et de résoudre un problème linéaire sur \vec{v} , $A\vec{v} = \vec{B}$. Cette résolution va demander l'assemblage d'un système linéaire très creux, ordonné sur l'indigage des voisins et par conséquent sans aucune symétrie prévisible. Le formalisme lagrangien numérote initialement les particules, ce qui fournit un indice de colonne pour le stockage dans la matrice, mais ne garantit pas l'interaction physique entre deux particules d'indices proches.

Sur un problème avec maillage, ce type de méthode est fréquemment utilisé car elle permet des stockages optimisés comme le stockage bande. Nous avons choisi un stockage Morse (Compressed Row Storage), explicité en Annexes, pour le stockage de la matrice car il permet d'accroître de façon importante la performance du calcul à l'exécution.

Dans le cadre d'un écoulement 2D où nous nous plaçons, la contrainte visqueuse agit sur chaque direction grâce à un laplacien 2D sur \vec{v} . La mise en oeuvre du système linéaire peut donc se valider en premier lieu par la résolution d'une équation de diffusion.

4.2 Résolution d'une équation de diffusion

On cherche donc à discrétiser l'équation :

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \nu \Delta \vec{v} \quad (4.2)$$

avec $\vec{v} = (u, v)$ et $\vec{v} = \vec{v}_0$ sur les bords, une condition à déterminer. Le laplacien sera discrétisé en répétant deux fois la dérivation du formalisme SPH (2.13).

$$\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) = \Delta \vec{v}$$

Cette approche est juste dans les cas qui nous intéressent ($\vec{\nabla} \wedge \vec{v} = 0$).

La description qui va suivre explicite les formulations des opérateurs qui ont été mises en oeuvre, et identifie les difficultés que le formalisme lagrangien entraîne lors de sa programmation. Par abus de langage, on désignera par le terme vecteur les variables physiques à plusieurs dimensions en espace, et les tableaux à une entrée qui serviront au calcul matriciel.

En premier lieu, la description du processus mené pour le gradient, reconduit ensuite pour le laplacien, permet de clarifier la mise en oeuvre.

4.2.1 Formulation matricielle de $\vec{\nabla} \vec{v}$

Soit un domaine constitué de N particules à vitesse \vec{v} . Grâce aux résultats de la partie [I], on sait, pour chaque particule i du domaine, écrire un schéma particulaire qui servira à exprimer les dérivées de chaque composante de \vec{v} comme une combinaison linéaire sur la vitesse de ses voisins j . Sur la composante u de \vec{v} , l'approximation SPH de $\langle \vec{\nabla}_x u \rangle$ est pour la particule i :

$$\langle \vec{\nabla}_x u \rangle_i = \sum_{j \in D(i)} \omega_j (u_j - u_i) A_{x,ij} \quad (4.3)$$

Le processus décrit ici est la construction d'un opérateur matriciel particulaire $\langle \vec{\nabla}_x \rangle$ qui permet d'obtenir $\langle \vec{\nabla}_x u \rangle$ en un produit matrice vecteur où on a noté $\langle \vec{\nabla}_x u \rangle = \langle \partial u / \partial x \rangle$.

On dispose de N valeurs de u sur le domaine, formant un tableau $\bar{\mathbf{u}}$. Pour interpréter (4.3) sur $\{1, \dots, N\}$ comme un produit matrice-vecteur entre un opérateur gradient particulaire $\langle \vec{\nabla}_x \rangle$ et $\bar{\mathbf{u}}$, il faut considérer cette expression sur un de ses voisins j . Lui-même a pour voisinage l'ensemble des particules k de l'ensemble $D(j)$:

$$\langle \vec{\nabla}_x u \rangle_j = \sum_{k \in D(j)} \omega_k (u_k - u_j) A_{x,jk} \quad (4.4)$$

Finalement, en utilisant (4.3)(4.4), on peut obtenir une combinaison linéaire globale sur $\bar{\mathbf{u}}$ qui s'écrirait :

$$\langle \vec{\nabla}_x \bar{\mathbf{u}} \rangle = \sum_{i \cup \{j \in D(i)\}} \langle \vec{\nabla}_x \rangle_l u_l, \quad i \in \{1, \dots, N\}. \quad (4.5)$$

Pour simplifier l'écriture de la suite, on introduit les notations $\hat{A}_{x,i}$ et $\hat{A}_{x,j}$:

$$\hat{A}_{x,i} = \sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{x,ij} \quad (4.6)$$

$$\hat{A}_{x,j} = \sum_{k \in D(j)} \omega_k A_{x,jk} \quad (4.7)$$

Considérons que l'ensemble $D(i)$ est constitué des particules $\{j_1, \dots, j_p\}$. Ainsi, on a :

$$\left\| \begin{array}{lll} \langle \vec{\nabla}_x u \rangle_i & = & -\hat{A}_{x,i} u_i + \dots + \omega_{j_1} A_{x,ij_1} u_{j_1} + \dots + \omega_{j_N} A_{x,ij_N} u_{j_N} \\ \langle \vec{\nabla}_x u \rangle_{j_1} & = & \omega_i A_{x,j_1i} u_i + \dots - \hat{A}_{x,j_1} u_{j_1} + \dots + \omega_{j_N} A_{x,j_1j_N} u_{j_N} \\ \langle \vec{\nabla}_x u \rangle_{j_N} & = & \omega_i A_{x,j_Ni} u_i + \dots + \omega_{j_1} A_{x,j_Nj_1} u_{j_1} + \dots - \hat{A}_{x,j_N} u_{j_N} \end{array} \right.$$

En considérant que les particules j_p peuvent décrire les N particules du domaine, ce système d'équations permet de définir l'opérateur $\langle \vec{\nabla}_x \rangle$.

Ce cas est simplifié en écriture du fait que l'on a considéré uniquement la dérivation selon x . Mais pour un opérateur laplacien, il faudra coupler les dérivations réalisées dans les deux directions. A cet effet, on décrit les schémas sur y , qui s'obtiennent par analogie :

$$\left\langle \frac{\partial u}{\partial y} \right\rangle_i = \sum_{j \in D(i)} \omega_j (u_j - u_i) A_{y,ij} \quad (4.8)$$

et pour le voisin j :

$$\left\langle \frac{\partial u}{\partial y} \right\rangle_j = \sum_{k \in D(j)} \omega_k (u_k - u_j) A_{y,jk} \quad (4.9)$$

avec

$$\hat{A}_{y,j} = \sum_{k \in D(j)} \omega_k A_{y,jk} \quad (4.10)$$

$$\hat{A}_{y,i} = \sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{y,ij} \quad (4.11)$$

4.2.2 Formulation matricielle de $\Delta \vec{v}$

Au niveau continu, la formulation du laplacien est simple : elle utilise successivement (4.3) et (4.8), deux fois chacune, puis les somme. Au niveau discret, le schéma suit au premier niveau la même simplicité :

$$\langle \Delta u \rangle_i = \langle \vec{\nabla}_x \langle \vec{\nabla}_x u \rangle \rangle_i + \langle \vec{\nabla}_y \langle \vec{\nabla}_y u \rangle \rangle_i \quad i \in \{1, \dots, N\} \quad (4.12)$$

Mais en développant, le premier et deuxième ordre de dérivation impliquent deux sommations successives. Cela suppose qu'il faut procéder à trois séries de boucles, que l'on appellera boucles i , j et k . La boucle i décrit chaque particule i du domaine, et pour chaque i , on réalise les boucles j qui décrivent les voisins de i :

$$\langle \Delta u \rangle_i = \sum_{j \in D(i)} \omega_j \left(\left[\left\langle \frac{\partial u}{\partial x} \right\rangle_j - \left\langle \frac{\partial u}{\partial x} \right\rangle_i \right] A_{x,ij} + \left[\left\langle \frac{\partial u}{\partial y} \right\rangle_j - \left\langle \frac{\partial u}{\partial y} \right\rangle_i \right] A_{y,ij} \right) \quad (4.13)$$

Dans la boucle qui décrit les voisins j , il faut faire une boucle sur les particules k voisines de j , c'est-à-dire les voisins des voisins de i .

Comme pour le gradient, on cherche, pour chaque particule i du domaine, à établir une forme discrète simple pour interpréter l'opérateur matriciel $\langle \Delta \rangle$. Cette forme est la combinaison linéaire sur les vitesses issues de (4.13) :

$$\langle \Delta u \rangle_i = \sum_{l \in D(i) \cup D(j)} \langle \Delta_l \rangle u_l, \quad i \in \{1, \dots, N\}. \quad (4.14)$$

Evidemment, une particule j_1 voisine de i est elle-même voisine de j_2 , une autre voisine de i . Par conséquent lors du calcul des composantes, certaines particules seront considérées deux fois lors des sommations, au premier puis au deuxième ordre de dérivation.

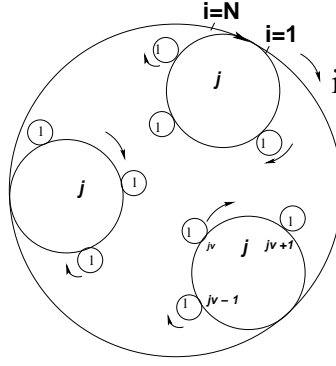


FIG. 4.1: Ordre de description des différentes boucles de voisins pour une particule i

Les contributions vont s'accumuler pour chaque particule, et ce, à chaque fois qu'elle est citée dans une liste de voisins, directs ou non. Ici encore, pour alléger la mise en oeuvre, le problème est découpé sur chaque direction du problème.

Conditions aux limites

Les conditions limites sont considérées à l'aide de particules fantômes. Mais la prise en compte des conditions limites n'alourdit pas la forme finale, car on ne résout pas sur ces particules, c'est-à-dire que l'on ne cherche pas à établir leur vitesse implicitement. Leur présence sert à réaliser les sommations en reportant leur contribution sur leur ancêtre physique.

Taille du problème

La taille du système est déterminée par le nombre de particules physiques, donc le problème est de taille N^2 , composé de N lignes et N colonnes. Toutes les composantes de la matrice ne sont pas remplies car, à rayon de lissage fini, toutes les particules du domaine ne sont pas considérées dans les listes de voisins. A rayon de lissage fixé dans des cas incompressibles, ou à rayon de lissage variable, il est possible d'évaluer le nombre de voisins de premier et second rang qui vont intervenir dans la sommation.

A $R = 1.2$, en dimension 2, le nombre de voisins est de 21, soit pour le problème $21N$ composantes non-nulles pour N^2 composantes. De plus, la description des voisins ne garantit pas l'existence d'une symétrie pour la matrice, à l'exception de la diagonale. Dans cette optique, on a utilisé pour l'approche un stockage morse.

Expression des composantes de $\mu\Delta\vec{v}$

Le test sur le laplacien du vecteur $\vec{v}(u, v)$ qui a été décrit plus haut doit servir à utiliser une formulation de $\mu\Delta\vec{v}$ pour chaque particule du domaine. Dans la perspective de calculs multiphasiques ou à viscosité dynamique μ variable, une formulation considérant une viscosité dynamique μ_i propre à chaque particule i a semblé appropriée. Les tests de validation sur le laplacien décrits plus loin sont fait à μ constant, ce qui donne l'opérateur laplacien Δ à une constante multiplicative près.

On décrit ici la formulation du système linéaire détaillée, telle qu'elle a été codée. L'application visée étant un calcul instationnaire, la matrice tient compte aussi de la composante de vitesse du temps $n + 1$ issue de la dérivée en temps. La description est faite ici de l'assemblage de la matrice du tenseur visqueux $div\tau = \mu\Delta\vec{v}$.

$$\langle div\langle\mu\vec{\nabla}u\rangle\rangle_i = \sum_{j \in D(i)} \omega_j \left(\left[\mu_j \left\langle \frac{\partial u}{\partial x} \right\rangle_j - \mu_i \left\langle \frac{\partial u}{\partial x} \right\rangle_i \right] A_{x,ij} + \left[\mu_j \left\langle \frac{\partial u}{\partial y} \right\rangle_j - \mu_i \left\langle \frac{\partial u}{\partial y} \right\rangle_i \right] A_{y,ij} \right) \quad (4.15)$$

Soit le développement de cette expression :

$$\begin{aligned} \langle div\langle\mu\vec{\nabla}u\rangle\rangle_i &= \sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{x,ij} \mu_j \left\langle \frac{\partial u}{\partial x} \right\rangle_j \\ &\quad - \left(\sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{x,ij} \right) \mu_i \left\langle \frac{\partial u}{\partial x} \right\rangle_i \\ &\quad + \sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{y,ij} \mu_j \left\langle \frac{\partial u}{\partial y} \right\rangle_j \\ &\quad - \left(\sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{y,ij} \right) \mu_i \left\langle \frac{\partial u}{\partial y} \right\rangle_i \end{aligned} \quad (4.16)$$

Il apparait ici que les sommations sur les voisins j de i sont à réaliser avec précaution. Les deux sommations présentes dans les parenthèses doivent être effectuées en premier lieu.

Cette étape accomplie, il faut voir comment traiter l'équation de diffusion préalablement considérée en tenant compte de la résolution temporelle implicite envisagée.

Combinaison linéaire sur \vec{v} pour l'équation (4.2)

La résolution de cette équation peut être couplée, c'est-à-dire donner simultanément u et v mais un choix de notre part fut de résoudre sur chaque direction successivement. Le but est d'identifier la quantité (4.16) à une forme que l'on pourra apparenter à une combinaison linéaire, par exemple sur u :

$$\langle \text{div} \langle \tau \cdot \vec{e}_1 \rangle \rangle_i = \langle \Delta u \rangle_i = a_i u_i + a_j u_j + a_k u_k + \dots$$

Au vu de la formulation décrite précédemment, c'est l'expression du laplacien de la composante u que nous allons ici décrire en projetant sur la direction x . Soit selon le formalisme SPH pour une particule i :

$$\begin{aligned} u_i^{n+1} - u_i^n &= -\frac{\delta t}{\rho_i} [\langle \vec{\nabla} p \cdot \vec{e}_1 \rangle_i^n - \langle \Delta u \rangle_i^{n+1} - \langle \vec{F} \cdot \vec{e}_1 \rangle_i^n] \\ u_i^{n+1} - \frac{\delta t}{\rho_i} \langle \Delta u \rangle_i^{n+1} &= -\frac{\delta t}{\rho_i} [\langle \vec{\nabla} p \cdot \vec{e}_1 \rangle_i^n - \langle \vec{F} \cdot \vec{e}_1 \rangle_i^n] + u_i^n \end{aligned}$$

Avec la forme (4.16) que nous avons citée plus haut, on peut esquisser une forme linéaire :

$$u_i^{n+1} - \frac{\delta t}{\rho_i} (a_i u_i^{n+1} + a_j u_j^{n+1} + a_k u_k^{n+1} + \dots) = -\frac{\delta t}{\rho_i} [\langle \vec{\nabla} p \cdot \vec{e}_1 \rangle_i^n - \langle \vec{F} \cdot \vec{e}_1 \rangle_i^n] + u_i^n \quad (4.17)$$

Le terme source prendra donc le gradient de pression, les forces volumiques (dont la gravité) et le terme de vitesse du temps n . On écrit donc une forme développée de :

$$u_i^{n+1} - \frac{\delta t}{\rho_i} \langle \text{div} \langle \mu \vec{\nabla} u \rangle \rangle_i \quad (4.18)$$

en développant dans (4.16) les dérivées sur u , on obtient :

$$\begin{aligned} u_i^{n+1} - \frac{\delta t}{\rho_i} &\left[\sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{x,ij} \mu_j \left(\sum_{k \in D(j)} \omega_k A_{x,jk} u_k^{n+1} - \hat{A}_{x,j} u_j^{n+1} \right) \right] \\ &+ \frac{\mu_i \delta t}{\rho_i} \left[\sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{x,ij} \left(\sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{x,ij} u_j^{n+1} - \hat{A}_{x,i} u_i^{n+1} \right) \right] \\ &- \frac{\delta t}{\rho_i} \left[\sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{y,ij} \mu_j \left(\sum_{k \in D(j)} \omega_k A_{y,jk} u_k^{n+1} - \hat{A}_{y,j} u_j^{n+1} \right) \right] \\ &+ \frac{\mu_i \delta t}{\rho_i} \left[\sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{y,ij} \left(\sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{y,ij} u_j^{n+1} - \hat{A}_{y,i} u_i^{n+1} \right) \right] \end{aligned}$$

Il faut supprimer les parenthèses présentes dans les crochets par un nouveau développement :

$$\begin{aligned}
u_i^{n+1} - \frac{\delta t}{\rho_i} & \left[\sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{x,ij} \mu_j \left(\sum_{k \in D(j)} \omega_k A_{x,jk} u_k^{n+1} \right) - \sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{x,ij} \mu_j \hat{A}_{x,j} u_j^{n+1} \right] \\
& + \frac{\mu_i \delta t}{\rho_i} \left[\sum_{j \in D(i)} (\omega_j A_{x,ij})^2 u_j^{n+1} - \left(\sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{x,ij} \hat{A}_{x,i} \right) u_i^{n+1} \right] \\
& - \frac{\delta t}{\rho_i} \left[\sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{y,ij} \mu_j \left(\sum_{k \in D(j)} \omega_k A_{y,jk} u_k^{n+1} \right) - \sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{y,ij} \mu_j \hat{A}_{y,i} u_j^{n+1} \right] \\
& + \frac{\mu_i \delta t}{\rho_i} \left[\sum_{j \in D(i)} (\omega_j A_{y,ij})^2 u_j^{n+1} - \left(\sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{y,ij} \hat{A}_{y,i} \right) u_i^{n+1} \right] \quad (4.19)
\end{aligned}$$

Dans le but de faire apparaître des coefficients pour chaque vitesse u_i , on fait un troisième développement :

$$\begin{aligned}
u_i^{n+1} - \frac{\delta t}{\rho_i} & \sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{x,ij} \mu_j \left(\sum_{k \in D(j)} \omega_k A_{x,jk} u_k^{n+1} \right) \\
& + \frac{\delta t}{\rho_i} \sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{x,ij} \mu_j \hat{A}_{x,j} u_j^{n+1} \\
& + \frac{\mu_i \delta t}{\rho_i} \sum_{j \in D(i)} (\omega_j A_{x,ij})^2 u_j^{n+1} \\
& - \frac{\mu_i \delta t}{\rho_i} \left(\sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{x,ij} \hat{A}_{x,i} \right) u_i^{n+1} \\
& - \frac{\delta t}{\rho_i} \sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{y,ij} \mu_j \left(\sum_{k \in D(j)} \omega_k A_{y,jk} u_k^{n+1} \right) \\
& + \frac{\delta t}{\rho_i} \sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{y,ij} \mu_j \hat{A}_{y,j} u_j^{n+1} \\
& + \frac{\mu_i \delta t}{\rho_i} \sum_{j \in D(i)} (\omega_j A_{y,ij})^2 u_j^{n+1} \\
& - \frac{\mu_i \delta t}{\rho_i} \left(\sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{y,ij} \hat{A}_{y,i} \right) u_i^{n+1}
\end{aligned}$$

En ordonnant les composantes suivant l'ordre particule, voisin, et voisin de voisin, c'est-à-dire i , j et k , la forme (4.17) est esquissée :

$$\begin{aligned}
u_i^{n+1} &- \frac{\mu_i \delta t}{\rho_i} \left(\sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{x,ij} \widehat{A}_{x,i} \right) u_i^{n+1} \\
&+ \frac{\delta t}{\rho_i} \sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{x,ij} \mu_j \widehat{A}_{x,j} u_j^{n+1} \\
&+ \frac{\mu_i \delta t}{\rho_i} \sum_{j \in D(i)} (\omega_j A_{y,ij})^2 u_j^{n+1} \\
&+ \frac{\mu_i \delta t}{\rho_i} \sum_{j \in D(i)} (\omega_j A_{x,ij})^2 u_j^{n+1} \\
&+ \frac{\delta t}{\rho_i} \sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{y,ij} \mu_j \widehat{A}_{y,j} u_j^{n+1} \\
&- \frac{\delta t}{\rho_i} \sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{y,ij} \mu_j \left(\sum_{k \in D(j)} \omega_k A_{y,jk} u_k^{n+1} \right) \\
&- \frac{\delta t}{\rho_i} \sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{x,ij} \mu_j \left(\sum_{k \in D(j)} \omega_k A_{x,jk} u_k^{n+1} \right)
\end{aligned}$$

Nous développons ces calculs pour se ramener à un calcul simple des composantes d'une matrice laplacien dans le formalisme SPH. La forme à coder sera donc :

$$\begin{aligned}
u_i^{n+1} &- \frac{\mu_i \delta t}{\rho_i} \left[\widehat{A}_{x,i}^2 + \widehat{A}_{y,i}^2 \right] u_i^{n+1} \\
&+ \frac{\delta t}{\rho_i} \sum_{j \in D(i)} \left[\omega_j \mu_j \left(A_{x,ij} \widehat{A}_{x,j} + A_{y,ij} \widehat{A}_{y,j} \right) + \mu_i \omega_j^2 \left(A_{x,ij}^2 + A_{y,ij}^2 \right) \right] u_j^{n+1} \\
&- \frac{\delta t}{\rho_i} \left[\sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{y,ij} \mu_j \left(\sum_{k \in D(j)} \omega_k A_{y,jk} u_k^{n+1} \right) + \sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{x,ij} \mu_j \left(\sum_{k \in D(j)} \omega_k A_{x,jk} u_k^{n+1} \right) \right]
\end{aligned}$$

4.3 Résolution d'une équation de convection-diffusion

En utilisant cet opérateur pour calculer le cas de convection-diffusion de Poiseuille, précédemment décrit en explicite, on va pouvoir mesurer l'intérêt pratique de cette résolution matricielle. Le facteur limitant qui nous a conduit dans cette voie est la stabilité temporelle ; on reprend par conséquent la discussion sur le choix du pas de temps.

Le caractère Lagrangien de SPH nous impose trois schémas en temps : un pour le transport des points, un pour l'équation de continuité et un pour l'équation du mouvement. La formulation implicite décrite jusqu'ici est d'ordre 1 sur la quantité de mouvement, c'est Euler Implicite. La force volumique équivalente $\vec{F}^n = \vec{\nabla} p^n / \rho^n + \vec{F}_{ext}$ imposée est considérée explicitement, et constitue le terme source.

4.3.1 Euler : ordre 1

Le système à résoudre est donc :

$$\begin{cases} \vec{v}^{n+1} - \nu \delta t \Delta \vec{v}^{n+1} = \vec{v}^n + \frac{\vec{\nabla} p^n}{\rho^n} + \vec{F}_{ext}. \\ \vec{x}^{n+1} = \vec{x}^n + \delta t \vec{v}^n \\ \rho^{n+1} = \rho^n - \rho^n \delta t \text{div} \vec{v}^n \end{cases} \quad (4.20)$$

Ainsi, comme en explicite, on retrouve l'établissement d'un régime stationnaire. Le profil s'obtient en ajoutant un peu de viscosité artificielle $\alpha = 0.8$. La dissipation induite permet d'atténuer le bruit numérique sur le profil de vitesse que l'on a vu précédemment. Ce schéma est inconditionnellement stable mais d'ordre faible.

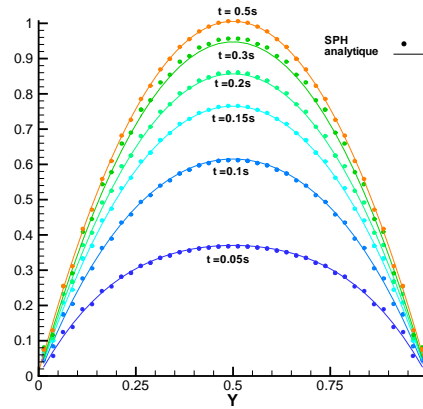


FIG. 4.2: Ecoulement à $Re = 1$ ($\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}$) Renormalisée avec Π_{ij}

4.3.2 θ -schéma : ordre supérieur à 1

L'intérêt du θ -schéma est d'atteindre l'ordre 2 pour $\theta = 0.5$, et de dégénérer vers le schéma d'Euler vu précédemment pour $\theta = 1$. Il faut pour cela prendre en compte une partie de la contrainte visqueuse dans le terme source :

$$u^{n+1} - \nu\theta\delta t\Delta u^{n+1} = u^n + \nu(1-\theta)\delta t\Delta u^n + \delta t \vec{e}_1 \cdot \vec{F}^n \quad (4.21)$$

Une analyse de Fourier du schéma montre que les valeurs de θ entre 0.5 et 1 assurent inconditionnellement la stabilité. Dans la pratique, on utilise donc $\theta = 0.5 + \iota$ avec ι petit devant 1.

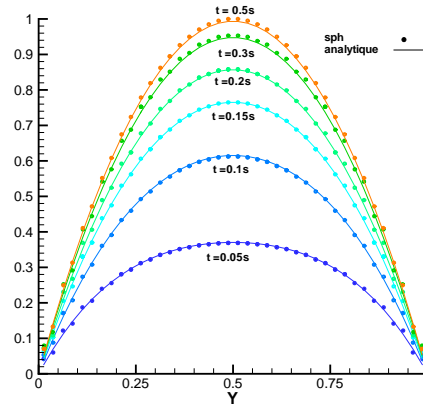


FIG. 4.3: Ecoulement à $Re = 1$ avec $\theta = 0.6$

Pour être globalement d'ordre 2 dans la résolution, un schéma général d'ordre 2 est proposé mais n'a pas pu être validé.

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho^{n+1/2} = \rho^n - \frac{\delta t}{2} \rho^n \operatorname{div} v^{\vec{n}} \\ v^{\vec{n}+1} - \nu\theta\delta t\Delta v^{\vec{n}+1} = v^{\vec{n}} + \nu(1-\theta)\delta t\Delta v^{\vec{n}} + \frac{\vec{\nabla} p^{n+1/2}}{\rho^{n+1/2}} \\ v^{\vec{n}+1/2} = \frac{v^{\vec{n}} + v^{\vec{n}+1}}{2} \\ x^{\vec{n}+1} = x^{\vec{n}} + \delta t v^{\vec{n}+1/2} \\ \rho^{n+1} = \rho^n - \rho^{n+1/2} \delta t \operatorname{div} v^{\vec{n}+1/2} \end{array} \right. \quad (4.22)$$

4.3.3 Solveur itératif-Temps calculs

La méthode GMRES est une méthode itérative de résolution qui utilise uniquement des produits matrice-vecteurs. Si, pour un système de taille N , on prend une base de Krylov de taille N , alors la résolution est coûteuse mais assimilable à une méthode directe.

On a pris la tolérance à 10^{-8} , et la base de Krylov à 30 vecteurs. Ainsi, dans les cas réalisés, un calcul ne met jamais plus de 5 itérations pour converger.

Le stockage morse de la matrice permet de réaliser des produits matrice-vecteurs impliquant uniquement les composantes non-nulles. C'est un gain important pour l'efficacité.

On procède à des comparaisons de cas tests à $CFL = 0.5$ et $\theta = 1$. Deux valeurs du rayon de lissage $R = 0.9$ et $R = 1.2$ sont testées avec des résultats similaires sur la simulation.

Cas $40 \times 40 = 1600$ points

Re	CFL_v/CFL_a	Temps CPU	Temps CPU	Temps Convergence
		Explicite	Implicite	Physique
0.01	$3 \cdot 10^{-3}$	153s/298s	7s/30s	0.005s
1	0.3	247s/748s	82s/231s	0.5

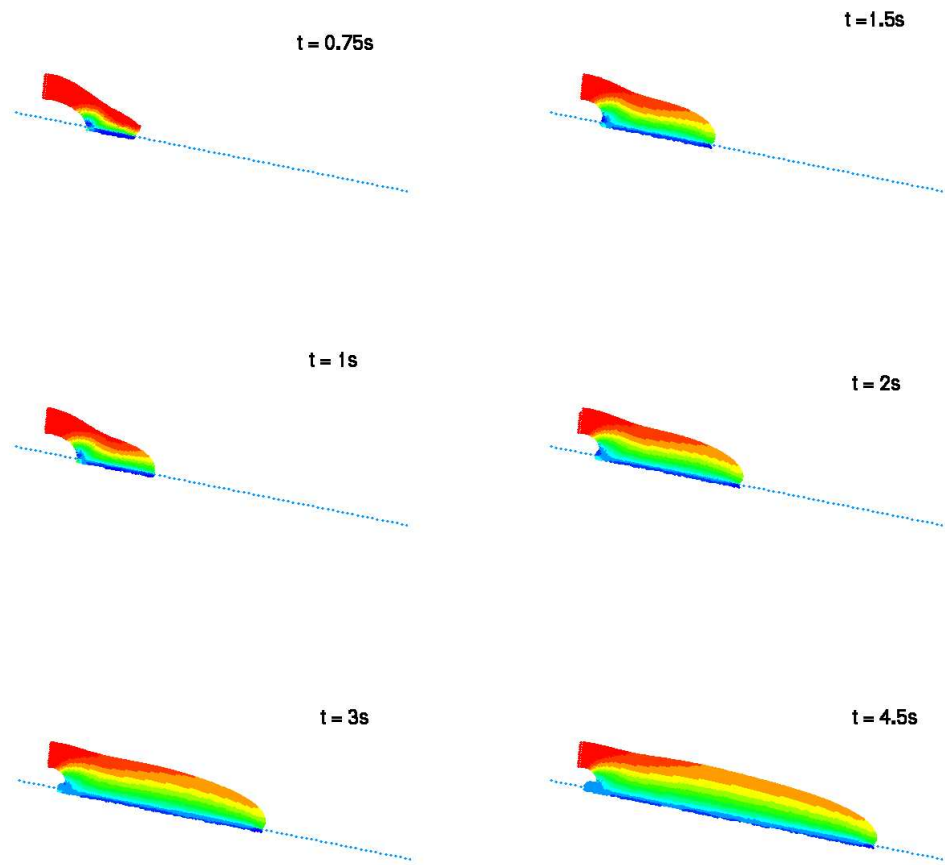
4.4 Applications

Le cas décrit a fait l'objet d'une communication à congrès en 2005 [21]. Pour obtenir un écoulement de Poiseuille surface libre 2D, on considère une condition d'entrée introduisant des particules dans un domaine. Au nombre de 20 sur la hauteur, elles sont soumises à la gravité et produisent un écoulement à $Re = 5$. Le jet tombe sur une paroi adhérente, inclinée selon une pente 0,2 et développe une couche limite. La simulation rend bien compte d'une adhérence à la paroi et d'une vitesse maximale en surface.

La condition d'entrée est créée par des particules fantômes placées en amont de l'entrée et dotées d'une vitesse imposée. En entrant dans le domaine, elles deviennent physiques, et sont remplacées à leur position initiale par de nouvelles particules fantômes.

Le traitement des conditions limites étant un point important de l'étude, on a figuré ces particules fantômes sur les images pour rendre compte du bon comportement de cette approche.

Le calcul a été mené sur le temps nécessaire pour obtenir un écoulement établi. Environ 9000 particules sont considérées dans le domaine au temps 4,5s.

FIG. 4.4: Ecoulement à $Re = 5$

4.5 Conclusion

Dans des régimes d'écoulements à bas nombre de Reynolds, l'approche implicite permet d'améliorer la vitesse d'exécution du calcul. Un facteur 10 peut être gagné sur $Re = 0.01$.

Cette approche est intéressante si on augmente la résolution du problème. En partant du fait que cette approche fonctionne sur un critère acoustique qui dépend de l'échelle de discrétisation en $O(h)$, l'explicite en régime visqueux a un critère sur δt en $O(h^2)$.

Donc si on multiplie par n le nombre de points pour gagner en précision, l'approche implicite est moins pénalisée sur le pas de temps puisque δt est divisé par n quand l'explicite δt est divisé par n^2 .

Cette remarque doit être tempérée par le fait que la résolution implicite comptabilise les opérations de constitution du système linéaire (équivalent à la somme des opérations explicites), mais en plus le stockage des composantes, et la résolution du système linéaire. Celle-ci est rapide devant la constitution de l'opérateur matriciel, et ce, pour un nombre de points croissant (étude qualitative constatée).

Chapitre 5

Approche de la contrainte visqueuse avec PSER

L'utilisation de $(\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla})$ présente deux écueils que l'on a cherché à contourner en proposant une nouvelle forme pour l'opérateur Δ .

D'un point de vue général, la description de deux niveaux de voisinage est un facteur de coût pour le calcul, particulièrement amplifié avec le traitement des conditions limites. De plus, des problèmes de stabilité rencontrés dans des cas d'écoulements de surfaces libres avec l'approche nous ont conduit à rechercher un terme de diffusion plus stable.

Le terme de Morris est un terme inspiré de la formulation PSE [23], auquel il ne manque que la renormalisation. Pour obtenir de la consistance dans le traitement de la diffusion tout au long du calcul, on lui a imposé à chaque pas de temps une étape de renormalisation, et on a baptisé cette forme PSER (2.85) dans le chapitre 2.

5.1 Approche explicite

Pour la valider sur des écoulements à bas nombre de Reynolds, on peut reprendre un écoulement de Poiseuille avec les termes visqueux proposés "Morris" et PSER, en travaillant sur les régimes vus précédemment.

Les équations demeurent identiques à celles indiquées dans (3.1), à l'exception de la formulation de $div\boldsymbol{\tau}$ que l'on réalise avec le schéma (2.85). Le réglage de la constante C^M pour le schéma de Morris est réalisé en cherchant à établir le profil de vitesse convergé donné par (3.6).

5.1.1 Cas $Re = 10^{-2}$

Forme Morris et PSER

On reprend les paramètres cités plus haut (3.3.1). Les formes utilisées permettent d'obtenir un profil en accord avec celui prédit par le calcul analytique sans moyenne spatiale.

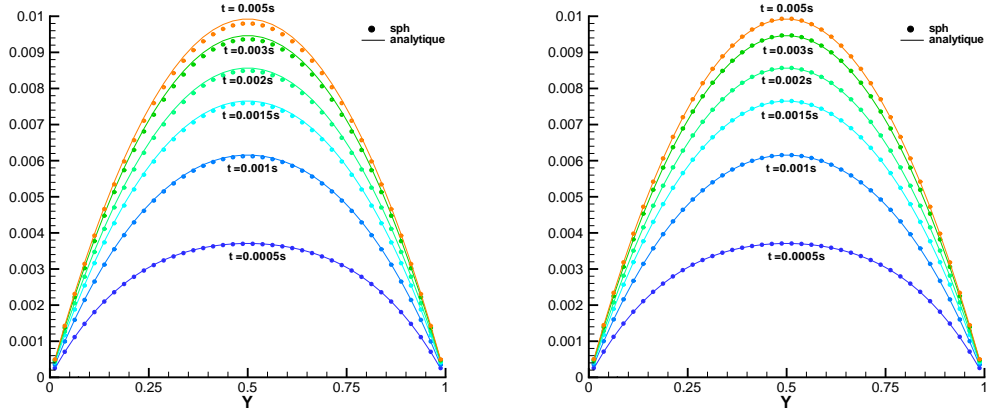


FIG. 5.1: Ecoulement à $Re 10^{-2}$ Morris (g.) et PSER (d.)

Comme on l'a vu en [2.7.1], les propriétés de consistance de la forme de Morris permettent de bien retrouver le profil analytique, avec un noyau donné pour une valeur de R adéquate. Ainsi, Morris indique utiliser un spline d'ordre 5 avec une valeur de R de 1, 5.

Ce raisonnement est équivalent au réglage initial et unique d'une constante multiplicative pour le schéma (2.80), lorsque R est donné. C'est ce choix qui est fait ici pour imposer $R = 1, 2$ afin d'avoir une valeur adaptée pour évaluer une quantité scalaire suivant (2.9). Ce réglage de la constante a imposé ici $C^M = 3.125$.

Toutefois son utilisation est peu pratique puisqu'elle dépend du noyau de convolution choisi et exige un réglage préalable du schéma suivant R . En outre, dans cet exemple, sa robustesse n'est pas mise à mal puisque l'écoulement considéré perturbe peu la discrétisation du domaine. A chaque pas de temps, on peut considérer que le domaine est représenté par une distribution régulière de particules, proche de celle imposée à l'instant initial.

Pour un traitement plus robuste des équations, on préférera donc utiliser un schéma renormalisé qui actualise la constante multiplicative d'appoint (2.85). L'intérêt est que la constante C_i s'ajuste grâce au modèle et permet de retrouver le profil analytique de façon satisfaisante.

5.1.2 Cas $Re = 1$

Forme Morris et PSER

Avec les paramètres de la section [3.3.2], on fait des simulation utilisations les formes citées.

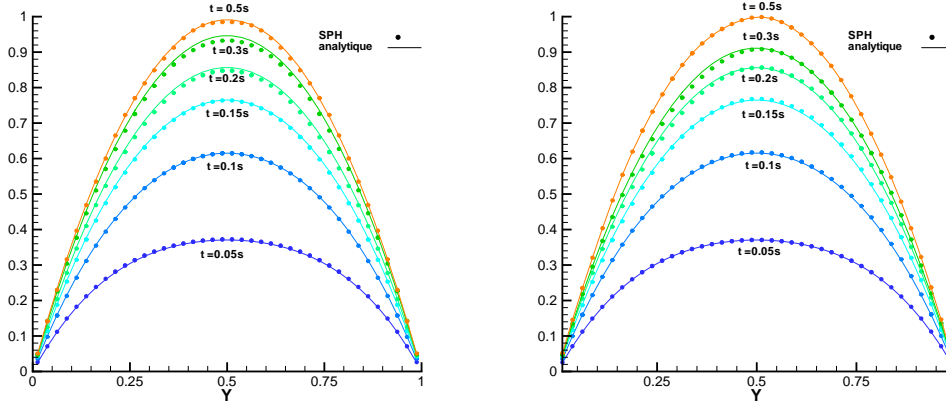


FIG. 5.2: Ecoulement à $Re 1$ Morris et PSER

Dans les deux cas $Re = 0.01$ et $Re = 1$, les formes considérées permettent de bien retrouver le profil analytique sans effectuer de lissage sur un profil mais seule l'approche "PSER" assure naturellement un traitement consistant des équations.

5.2 Formulation implicite

Compte tenu des développements réalisés dans le chapitre précédent, il a été aisé de mettre au point une version implicite du schéma considéré.

L'algorithme que l'on cherche ici à implémenter doit être considéré en deux étapes. L'ajout d'une procédure d'évaluation de la constante de renormalisation, ce qui s'apparente au calcul des matrices B_{ij} , est réalisée de manière explicite.

5.2.1 Etape 1 : calcul de la constante locale de renormalisation C_i

On calcule la valeur C_i du laplacien discret d'un polynôme $P2$ au point i , par exemple $\|\vec{r}_i\|^2$:

$$C_i = \langle \Delta \|\vec{r}\|^2 \rangle_i^{PSE} = \sum_{j \in D(i)} \omega_j (\|\vec{r}_i\|^2 - \|\vec{r}_j\|^2) \cdot \frac{\|\vec{r}_{ij}\|^2}{h_{ij}^3} \cdot \frac{\Theta'_{ij}}{h_{ij}^3} \quad (5.1)$$

5.2.2 Etape 2 : approche matricielle pour $\langle \Delta u \rangle_i^{PSE}$

Le schéma à impliciter est donc :

$$\langle \Delta v \rangle_i^{PSE} = \sum_{j \in D(i)} \omega_j \cdot u_{ij} \cdot \frac{4}{C_i} \frac{\|\vec{r}_{ij}\|^2}{h_{ij}^3} \cdot \frac{\Theta'_{ij}}{h_{ij}^3} \quad (5.2)$$

Pour construire l'opérateur matriciel laplacien associé, le processus se simplifie par rapport à [4], à deux boucles i, j . La boucle i décrit chaque particule i du domaine, et pour chaque i on réalise les boucles j sur les voisins de i :

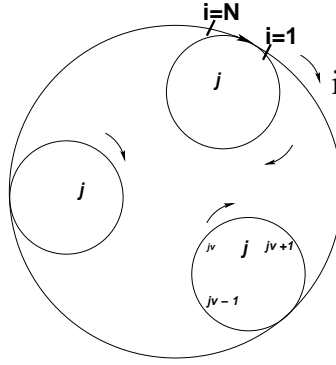


FIG. 5.3: Ordre de description des boucles de voisins pour une particule i

Ici encore, pour alléger la mise en oeuvre, le problème est découpé sur chaque direction du problème.

Ecriture du Laplacien sous forme SPH

On cherche, pour chaque particule i du domaine, à interpréter dans la combinaison linéaire sur les vitesses issue de (5.2) l'opérateur matriciel $\langle \Delta \rangle$ tel que :

$$\langle \Delta u \rangle_i = \sum_{j \in D(i)} \langle \Delta \rangle_j u_j, \quad i \in \{1, \dots, N\}. \quad (5.3)$$

Commentaires

Ici encore, la taille du système est déterminée par le nombre de particules physiques, donc le problème est de taille N , composé de N lignes et N colonnes, mis en mémoire avec un stockage morse. Les conditions limites sont toujours considérées à l'aide de particules fantômes sans résoudre sur ces particules.

C'est dans cette expression que l'on va exprimer une forme linéaire sur les u_i $i \in \{1, ..N\}$:

$$u_i^{n+1} - \frac{\mu_i \delta t}{\rho_i} \sum_{j \in D(i)} \omega_j \cdot u_{ij}^{n+1} \cdot \frac{4}{C_i} \frac{\|\vec{r}_{ij}\|^2}{h_{ij}^3} \cdot \frac{\Theta'_{ij}}{h_{ij}^3} = S_i^n \quad (5.4)$$

Le terme source S_i^n prendra donc le gradient de pression, les forces volumiques, dont la gravité, et le terme de vitesse du temps n . On pose :

$$A_{ij} = \vec{\nabla}_i W_{ij} = \frac{4}{C_i} \frac{\|\vec{r}_{ij}\|^2}{h_{ij}^3} \cdot \frac{\Theta'_{ij}}{h_{ij}^3} \quad (5.5)$$

et on réécrit (5.4) :

$$u_i^{n+1} - \frac{\mu_i \delta t}{\rho_i} \sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{ij} u_{ij}^{n+1} = S_i^n \quad (5.6)$$

Dans le but de faire apparaître des coefficients pour chaque vitesse u_i ;

$$u_i^{n+1} + \frac{\mu_i \delta t}{\rho_i} \sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{ij} u_j^{n+1} - \frac{\mu_i \delta t}{\rho_i} \sum_{j \in D(i)} \omega_j A_{ij} u_i^{n+1} = S_i^n \quad (5.7)$$

5.3 Résolution d'une équation de convection-diffusion

Les deux schémas en temps vu précédemment ont été implémentés :

5.3.1 Euler : ordre 1

$$\begin{cases} \vec{v}^{n+1} - \nu \delta t \Delta \vec{v}^{n+1} = \vec{v}^n + \vec{F}^n \\ \vec{x}^{n+1} = \vec{x}^n + \delta t \vec{v}^n \\ \rho^{n+1} = \rho^n - \rho^n \delta t \operatorname{div} \vec{v}^n \end{cases} \quad (5.8)$$

Son comportement sur un phénomène instationnaire a été validé :

5.3.2 θ -schéma : ordre supérieur à 1

Pour monter en ordre, le θ -schéma est lui aussi testé mais ne montre pas d'avantage net sur le schéma d'Euler.

$$\vec{v}^{n+1} - \nu \theta \delta t \Delta \vec{v}^{n+1} = \vec{v}^n + \nu(1 - \theta) \delta t \Delta \vec{v}^n + \vec{F}^n \quad (5.9)$$

Si θ vaut 1, le schéma est d'ordre 1 mais d'ordre 2 si θ vaut 0.5.

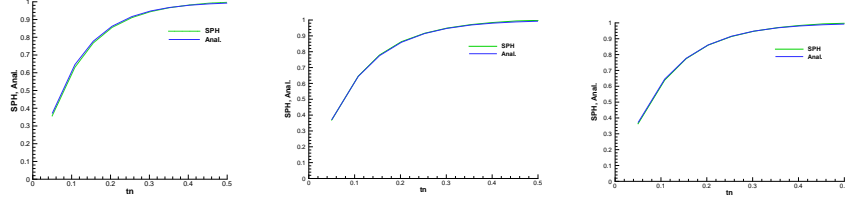


FIG. 5.4: Ecoulement à $Re = 1$ erreur sur l'amplitude de vitesse avec $\theta = 1$ (Euler), $\theta = 0.55$ et $\theta = 0.75$

5.3.3 Temps calculs

On conserve le solveur itératif GMRES vu précédemment. Les temps calcul à $R = 1.2$ montrent :

Re	CFL_a/CFL_v	Temps CPU Explicite	Temps CPU Implicite
0.01	0.0003	534s	7s
1	0.3	543s	53s

Les temps calculs sont nettement améliorés par rapport aux chapitres précédents. Ce résultat était attendu puisque le nombre d'opérations est diminué avec la modification des schémas

5.4 Conclusion

L'utilisation de la forme PSER permet de gagner en temps calcul pour les approches temporelles explicite et implicite.

Toutefois, avec PSE, le schéma peut devenir instable si on monte en nombre de Reynolds pour le régime. Une solution est alors de borner la constante C_i . On conserve ainsi un bon ordre de résolution.

Toutefois, d'un point de vue général, pour le schéma $(\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla})$ comme pour le schéma considéré ici, le cas de Poiseuille ne permet pas de conclure de manière satisfaisante puisque l'on voit que la précision en temps du schéma n'altère pas les résultats. Il faudrait reconduire une étude sur un cas permettant de valider les développements réalisés.

Conclusion de la seconde partie

Validation d'un écoulement de Poiseuille

Parmi les schémas testés, certains ne conviennent pas et d'autres montrent des qualités intéressantes de précision. Le schéma renormalisé PSER proposé montre un bon comportement pour un nombre d'opérations nettement réduit. L'approche implicite pour la marche en temps est très économique en temps calcul, particulièrement si on exploite les propriétés de renormalisation du gradient en $(\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla})$, ou la forme PSER qui ne décrit qu'une liste de voisins par particule.

Limites du cas considéré

L'écoulement de Poiseuille est une bonne étape pour la validation du code mais n'est pas suffisant pour valider le traitement d'un problème quelconque de mécanique des fluides. La symétrie du problème, invariant en translation suivant l'axe de l'écoulement, simplifie le calcul des déformations. En outre, les schémas en temps ne peuvent pas être validés de manière satisfaisante. Un écoulement en cavité pourrait être le test nécessaire adéquat.

Perspectives

En mécanique des fluides, la méthode ne demande donc qu'à être validée dans une plus large gamme de cas, et ce avec une efficacité accrue. Si des validations expérimentales ne peuvent être faites, une comparaison à des résultats fournis par des méthodes eulériennes reconnues constitue aussi un bon moyen de tirer des conclusions sur la validité des développements conduits. Ainsi, dans un article sur la modélisation des phénomènes d'inclusion d'air en hydrodynamique [18], les auteurs utilisent une approche SPH-diphasique et cherchent à se valider grâce à une comparaison à des méthodes de type front tracking. Il apparaît que des instabilités diverses, plus ou moins déstabilisatrices, sont à considérer dans tous les cas. Ils retrouvent ainsi la nécessité de prendre en compte la diffusion lorsque l'on utilise la méthode et quantifie les échelles de diffusion numérique nécessaires.

On voudrait donc chercher à poursuivre dans cette voie, qui correspond au champ d'application recherché pour la méthode en trouvant des références expérimentales, ou de haute résolution pour la validation.

Troisième partie

Ecoulements multiphasiques : courants de densité

Chapitre 6

Introduction aux courants de densité

Les courants de densité interviennent dans une large gamme de phénomènes étudiés à l'IFP. Ils existent durant la production polyphasique avec le phénomène de slugging, et décrivent en ingénierie de réservoir les avalanches-sous-marines. Leur origine est l'existence, au sein d'un milieu multiphasique, d'un déséquilibre mécanique entre les espèces, qui induit naturellement des courants fortement gouvernés par la gravité.

Ces phénomènes sont intéressants à simuler avec la méthode SPH car ils s'intègrent dans la gamme des problèmes à grand mouvement d'interface dont la description par le calcul direct classique est malaisée. Ainsi, dans cette partie, le potentiel du formalisme Lagrangien est mis à l'épreuve. D'un point de vue physique, ces écoulements sont très sensibles aux instabilités qui apparaissent aux interfaces [53], ce qui constitue un défi pour les méthodes numériques en général et un excellent test pour SPH en particulier.

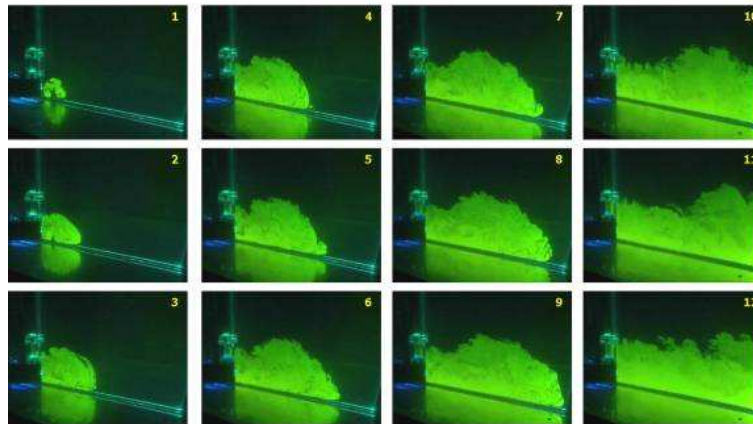


FIG. 6.1: Courant de gravité sur plan incliné [69]

6.1 Description

L'exemple académique sur lesquels on les étudie ici sont les écoulements d'échange, ou Lock Exchange. Le dispositif expérimental est constitué d'un canal fermé, divisé en deux compartiments par une vanne verticale. Chaque compartiment est rempli d'un fluide, leurs densités étant différentes. Les fluides sont initialement au repos, c'est-à-dire sous pression hydrostatique, puis mis en contact instantanément. La recherche d'un nouvel équilibre mécanique entre les deux milieux stimule un échange des fluides. On observe alors une intrusion du fluide dense sous le fluide léger, en bas du compartiment. L'expérience terminée, le nouvel état d'équilibre entre les milieux se caractérise par une interface horizontale et une pression globale en équilibre hydrostatique.

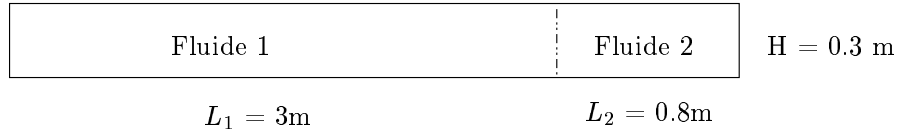


FIG. 6.2: Dispositif et configuration initiale pour l'écoulement d'échange de [34].

Pour comprendre le déroulement de ces phénomènes, un grand nombre d'auteurs ont réalisé des études expérimentales en utilisant différentes combinaisons de gaz et de liquides. Ils expliquent le déroulement des intrusions en utilisant principalement des théories issues de l'hydraulique mais sans pouvoir trancher en faveur d'un modèle totalement prédictif. Les études expérimentales mettent en évidence deux classes de fronts :

- Des intrusions de front denses qui sont difficiles à reproduire par le calcul. Le courant dense est sensible aux effets diffusifs, générateurs d'instabilités, présents dans la couche de mélange. Ces instabilités existent pour toutes les longueurs d'ondes émises dans le domaine, une analyse mathématique le démontre [3] [53].

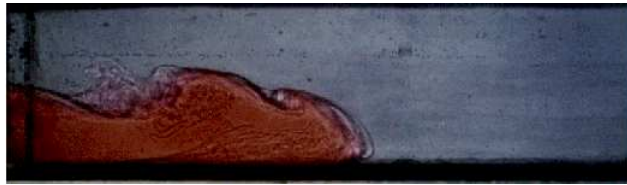


FIG. 6.3: Intrusion de front dense [78]

- Des intrusions de front légers, qui se déplacent le long du plafond du compartiment. Ils sont facilement reproductibles par le calcul, parce qu'il sont peu sensibles à la diffusion et aux instabilités.

La difficulté à expliquer et à prédire les courants de densité tient au fait qu'un grand nombre de paramètres interviennent dans leur déroulement et propose une gamme de régimes très

variée. D'une manière générale, ils se différencient par :

- Le ratio de densité des constituants : en considérant deux fluides en présence, un dense de densité ρ_d et un léger de densité ρ_l , leur rapport est $\gamma = \rho_l/\rho_d < 1$.
- Les viscosités respectives des constituants et le nombre de Reynolds résultant pour l'écoulement. Le rôle de la turbulence peut être à prendre en compte dans l'évolution de l'écoulement.
- L'existence, ou non, d'un mélange à la frontière entre les fluides : cela revient à considérer l'action de la tension de surface.

Le cas où les densités sont proches, $\gamma \sim 1$, est dénommé cas de Boussinesq. Sa résolution numérique peut être optimisée par un adimensionnement judicieux de l'équation de conservation de quantité de mouvement.

Les cas où les milieux présentent de très fortes différences (eau/air) sont aussi connus. Dans le cas d'un écoulement de surface libre, c'est la rupture de barrage pour laquelle Ritter propose une solution sur front sec. Ce cas est utile pour valider les vitesses de front dans les régimes asymptotiques. Cette vitesse est $2\sqrt{gH_B}$ pour le front dense, où H_B est la hauteur initiale d'eau au sol. La vitesse de l'onde de surface est $-\sqrt{gH_B}$ en surface.

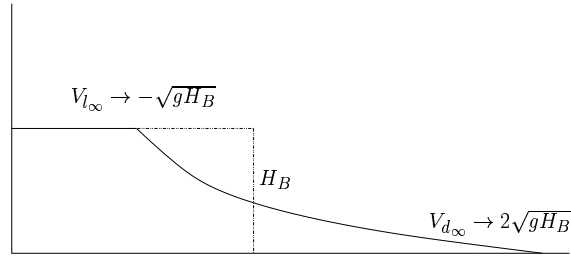


FIG. 6.4: Solution de Ritter pour un écoulement de surface libre

Ces fronts se déplacent à vitesse quasi-constante, ce qui permet de formuler pour chaque expérience deux nombre de Froude. On les dénote Froude dense Fr_d , et Froude léger Fr_l . Ils sont obtenus en adimensionnant par la même vitesse pour tous les rapports de densités. Dans notre étude, ce nombre utilisera toujours la même vitesse non-dimensionnelle V_0 .

$$Fr_{d,l} = \frac{V_{d,l}}{V_0} \quad \text{avec } V_0 = \sqrt{gh_f} \quad (6.1)$$

La longueur h_f utilisée comme échelle de longueur correspond à la demi-hauteur du volume de fluide initialement disposé. En effet, en expérience de Lock Exchange, il s'avère que dans le cas conservatif, les deux intrusions occupent le compartiment à mi-hauteur.

L'interface entre les deux milieux va être modifiée au cours du temps. Initialement de longueur H , elle change de direction et de forme, au fur et à mesure que les deux bouffées s'éloignent, selon une onde d'expansion. Celle-ci se développe plus ou moins nettement, en fonction de l'ampleur du phénomène de mélange se déroulant dans le domaine. Pour chaque intrusion, on cherche à interpréter dans le sillage "lointain" une partie quasi-horizontale, pour définir une hauteur de front h de l'intrusion dense, et donc $H - h$ pour l'intrusion légère.

Ces hauteurs de front sont des grandeurs difficiles à mesurer rigoureusement. Leur connaissance constitue un outil descriptif supplémentaire pour expliquer l'existence d'une dissipation dans le phénomène. Dans ce type d'écoulement, celle-ci est constatée expérimentalement, mais il est difficile de la démontrer théoriquement.

En utilisant un raisonnement hydraulique décrit dans la suite, Benjamin obtient un nombre de Froude pour chaque intrusion, fonction du rapport h/H . Ces gammes de valeurs vont permettre de formuler certaines hypothèses sur l'existence de différents phénomènes dissipatifs. Ainsi, il évoque deux explications, qui seront reprises plus tard par Keller et Chyou (KC) [44] :

- Soit le nombre de Froude associé est sous-critique $Fr < 1$, alors le courant est conservatif est connecté par l'onde d'expansion à l'intrusion dense dissipative.

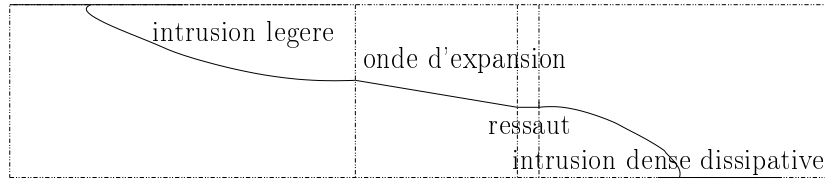


FIG. 6.5: Ecoulement d'échange, Intrusion avec ressaut.

- Soit le nombre de Froude associé est supercritique $Fr > 1$, c'est-à-dire que les ondes de gravité présentes dans l'écoulement sont plus rapides que le front. Un ressaut dissipatif se forme dans le sillage du courant dense en se couplant à l'onde d'expansion, Fig(6.1). Cette hypothèse permet de considérer les deux intrusions conservatives.

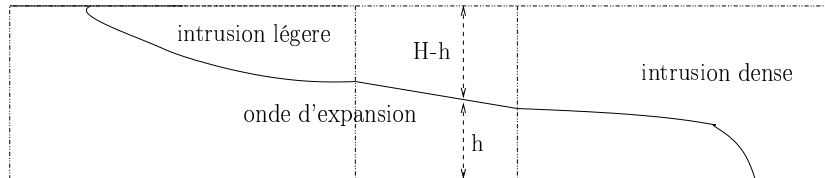


FIG. 6.6: Ecoulement d'échange, Intrusion sans ressaut.

6.2 Modèle hydraulique de Benjamin [3]

Le fluide est supposé au repos, dans un référentiel en translation lié au front. C'est-à-dire qu'il n'y a pas d'écoulements internes supplémentaires. Dans une hypothèse où l'on se place sur l'interface, où le théorème de Bernoulli s'applique, une étude analytique réalisée avec une approche hydraulique décrit les courants induits par l'éviction de la paroi : le courant léger et le courant dense.

Benjamin considère de l'eau lâchée dans de l'air, c'est-à-dire un cas où $\gamma \rightarrow 0$. En considérant l'intrusion du fluide dense, il mène deux raisonnements pour interpréter sa mise en place, un conservatif en énergie puis un dissipatif. En effet, l'hypothèse d'un écoulement rigoureusement conservatif semble peu probable. L'expérience menée quelques années auparavant par Keulegan [45], en régime de Boussinesq miscible montrait le nombre de Froude insensible à la hauteur du domaine H mais sensible à la valeur du nombre de Reynolds ($F_H = 0.42$ à $Re = 600$ et 0.48 à $Re = 15000$).

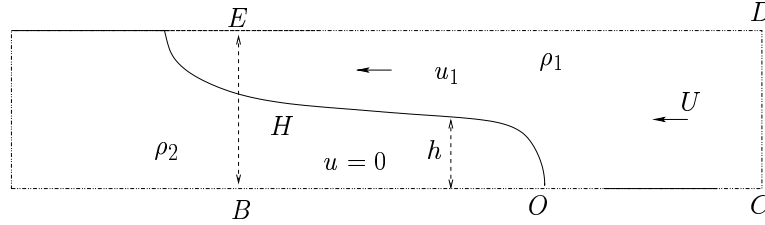


FIG. 6.7: Dispositif de Benjamin

L'étude de Benjamin est restreinte au cas $\gamma \rightarrow 0$. Son raisonnement est repris dans l'article de Shin & al. [77] pour un cas général pouvant prendre en compte de toutes les valeurs de γ . C'est ce raisonnement que l'on décrit ici. En premier lieu, l'équation de continuité donne :

$$u_1(H - h) = UH \quad (6.2)$$

L'expression horizontale de la conservation de la quantité de mouvement est :

$$\int_B^E p \, dz + \int_B^E \rho u^2 dz = \int_C^D p \, dz + \int_C^D \rho U^2 dz \quad (6.3)$$

avec sur BE :

$$p = \begin{cases} p_B - g\rho_2 z & \text{si } 0 < z < h \\ p_B - g\rho_2 h - g\rho_1(z - h) & \text{si } h < z < H \end{cases}$$

et sur CD :

$$p = p_C - g\rho_1 z \quad (6.4)$$

Le théorème de Bernouilli appliqué sur BO donne

$$p_B = P_O$$

et sur OC ,

$$p_C = p_O - \frac{1}{2}\rho_1 U^2$$

Ainsi, en utilisant les égalités (6.2) et (6.3) de mouvement globale, on obtient une forme de U qui dépend de h/H . De cette manière, plusieurs solutions existent pour la vitesse U en fonction de la hauteur de chaque courant, exprimé avec le rapport h/H .

$$\frac{U^2}{gH} = \frac{(1-\gamma)}{\gamma} \frac{h(2H-h)(H-h)}{H^2(H+h)} \quad (6.5)$$

Si le système est conservatif en énergie, la relation de Bernouilli sur l'interface couplée à (6.5) donne seulement deux valeurs de h/H possibles, et une est non-triviale, c'est $h/H = 0.5$. C'est-à-dire que chaque intrusion occupe une moitié du compartiment en hauteur.

Dans la gamme des nombre de Froude associés à ces hauteurs de front, le régime est supercritique si $0.347 < h/H < 0.5$, et sous-critique pour $0. < h/H < 0.347$.

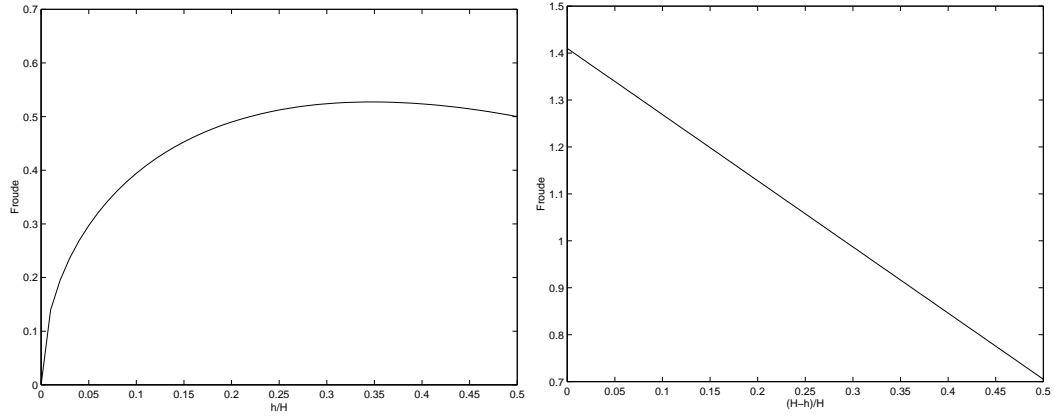


FIG. 6.8: Nombre de Froude F associé au front dense et F_l associé au front léger.

La valeur de h/H correspondant le plus probablement à la configuration physique est celle qui maximise le flux d'énergie pendant l'écoulement. Elle vérifie U maximale, qui équivaut à $u_1 = \sqrt{gh}$. Soit F le nombre de Froude calculé sur la hauteur du compartiment :

$$F = \frac{U}{\sqrt{(1/\gamma - 1)gH}}$$

Il vaut pour $h/H = 0.347$:

$$F = 0.527$$

alors que si le courant est conservatif, la seule valeur admissible est $h/H = 0.5$, à cause de (6.2) et (6.3), et donc :

$$F = 0.5$$

Il est difficile de conclure expérimentalement laquelle des deux hypothèses, écoulement conservatif ou dissipatif, est correcte car les valeurs prédites par les modèles sont très proches.

Dans le cas $\gamma \rightarrow 0$, Benjamin propose, en suivant ce raisonnement un nombre de Froude F_l pour l'intrusion légère.

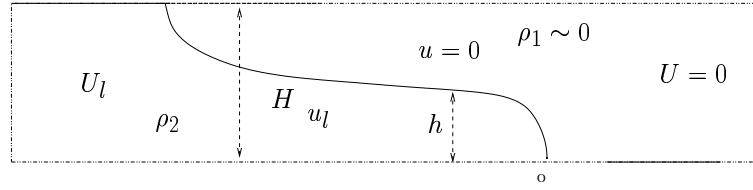


FIG. 6.9: Dispositif de Benjamin

$$F_l = \frac{U_l}{g(H-h)} = \left(\frac{h(2H-h)(H+h)}{H(2H-h)} \right)^{\frac{1}{2}}$$

Celui-ci est basé sur la hauteur $H-h$ et la vitesse U_l . En fonction de $(H-h)/H$, l'intervalle des valeurs physiquement admissibles pour h , $[0; 0.5H]$, est décrit. Ainsi :

$$\lim_{h \rightarrow H} F_l = \sqrt{2}$$

et dans le cas asymptotiquement conservatif :

$$\lim_{h \rightarrow H/2} F_l = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

6.3 Comment expliquer l'existence d'une dissipation

Compte-tenu des résultats expérimentaux produits sur le sujet, les modèles de Benjamin qui viennent d'être présentés ne suffisent pas à expliquer l'origine et l'expression des phénomènes dissipatifs existants dans l'expérience.

En effet, les deux hypothèses sur l'évolution de l'énergie dans l'écoulement trouvent facilement des contre-exemples dans la littérature. De plus, ces modèles ne peuvent pas être validés sur les vitesses de front, puisque les valeurs prédites sont assez proches. Les discussions portent donc le plus souvent sur les hauteurs des intrusions respectives.

Toutefois, ce rapport h/H n'apporte pas d'informations sur l'expression de la dissipation. Afin d'améliorer la théorie de Benjamin, plusieurs auteurs reprennent en partie son raisonnement et proposent leur modèle pour expliquer les résultats expérimentaux :

1. Keller et Chyou [44] suggèrent que l'on interprète les écoulements super et sous-critiques décrits plus haut, non pas en fonction du nombre de Froude, mais selon le rapport de densité. Ainsi, ils concluent que la dissipation s'exprime, suivant la valeur de γ , avec l'onde d'expansion seule ou accompagnée d'un ressaut hydraulique. Pour valider ce modèle, ils réalisent deux séries d'expériences dans les régimes associés aux deux cas. Mais les intrusions induites sont à trop bas nombre de Reynolds pour ne pas soupçonner l'influence des couches limites dynamiques sur cette transition qui fait disparaître le ressaut. Leur théorie n'est donc pas validée.
2. Klemp & al. [46] utilisent les équations de Saint-Venant. Ils prédisent une vitesse de front inférieure à la vitesse proposée par le modèle de Benjamin conservatif. Assurant la validité du raisonnement mené, ils concluent ainsi que le phénomène est forcément dissipatif.
3. Linden, Lowe et Rottman (LRL) [53] proposent un modèle couplé aux équations de Saint-Venant, qui assure la continuité entre l'onde d'expansion et le ressaut hydraulique éventuel. Pour chaque rapport de densité, leur modèle propose une vitesse pour l'onde d'expansion et pour le ressaut, fonctions du rapport h/H . La valeur pour laquelle la vitesse de l'onde d'expansion est égale à celle du ressaut est déclarée hauteur valide. Avec l'intervention de la simulation numérique de Birman, Martin et Meiburg (BMM) [8], ils confrontent les hauteurs obtenues et déduisent que seul le cas sans ressaut est valide.

Ces approches ont progressivement permis de cerner les modes de dissipation présents dans les écoulements d'échange. Elles ont aussi contribué à observer le phénomène non plus suivant le seul critère h/H mais selon γ .

A cet effet, Gröbelbauer & al. [34] mènent une étude avec des mélanges de gaz et de liquides, en considérant implicitement une diffusion des espèces. Une corrélation avec les résultats expérimentaux de Keller et Chyou [44] est faite.

Après exploitation des résultats expérimentaux, les auteurs ont tenté de valider leurs résultats avec *Phoenix*, un code volume finis dédié initialement au calcul diffusif. Une prise en compte de la turbulence est faite ainsi qu'une simulation de la diffusion des espèces, importante pour obtenir la convergence du calcul. Mais l'approche numérique ne parvient pas à rendre compte de la vitesse de l'intrusion du front dense.

6.4 Conclusion

L'étude des courants de densité semble donc passer désormais par l'utilisation du calcul numérique pour valider les modèles descriptifs du phénomène. Toutefois, la présence de turbulence et de fluides miscibles dans les cas considérés rendent le calcul difficile, et impose l'utilisation de codes spécifiques pour assurer des validations fiables.

Chapitre 7

Simulation d'écoulements d'échange

7.1 Un nouvel outil de description des courants de densité

En manque de solutions pour expliquer la phénomologie des courants de densité, la simulation numérique a été sollicitée pour fournir d'autres réponses au sujet. Après avoir réalisé que les codes généraux ne pouvaient qu'être grossièrement qualitatifs et incapables de reproduire l'ensemble des régimes, certains auteurs, en tenant compte des capacités du calcul numérique (modèles, puissance de calcul), ont entrepris des simulations plus fiables, réalisées sous des hypothèses restrictives (Saint Venant 2D, équation de Boussinesq) mais ne validant pas de façon univoque un modèle précis.

Néanmoins, des publications récentes proposent, avec des méthodes d'ordre élevé (spectrale, Eléments Finis), et des niveaux de discrétisation fins, des résolutions robustes. Celles-ci traitent des écoulements avec plus de régimes en décrivant plusieurs rapports de densité γ , ainsi que l'intervention de la miscibilité.

Leur intérêt est la facilité de leur exploitation. Elles proposent une interprétation visuelle des écoulements qui permet de les différencier. Sur les images communiquées, on voit bien les instabilités de Kelvin-Helmoltz à l'interface, ne se développant pas de la même manière, suivant les valeurs de Re et γ (symétriques dans le régime de Boussinesq, asymétriques si γ sort de cette gamme).

Pour un milieu fluide non-miscible, une discontinuité sur les matières existe, et peut être modélisée comme un choc sur les espèces. Pour résoudre le mouvement de cette interface, le "Shock-Capturing" et le "Front Tracking" sont deux approches. La première va construire une solution discontinue rendant compte intrinsèquement de l'interface, et adaptée pour ne pas induire de perturbations numériques. La seconde se caractérise par un transport de l'interface avec une équation de convection (concentration en VOF, distance à l'interface en Level-Set) mais présente l'inconvénient de diffuser numériquement la discontinuité de l'interface au cours du calcul.

Toutefois, une partie de ces expériences prennent en compte des fluides miscibles, telle l'expérience de Gröbelbauer & al. [34], qui a d'ailleurs suggéré l'étude numérique d'Etienne & al. [27]. Compte-tenu des nombres de Schmidt expérimentaux, non-communiqués, il faut considérer la miscibilité lors de la simulation.

7.1.1 Simulation Directe avec des méthodes académiques d'ordre élevé

En se restreignant à des cas où la différence entre la densité des milieux est faible $\gamma \sim 1$, on peut modifier les équations du système et obtenir des équations adimensionnées, que l'on dénomme équations de Boussinesq. Deux paramètres interviennent pour régler le régime, le nombre de Schmidt Sc et celui de Grashof Gr :

$$Gr = \left(\frac{v_0 h_f}{\nu} \right)^2 \text{ et } Sc = \frac{\nu}{\kappa} \quad (7.1)$$

A l'aide de méthodes spectrales, Härtel & al. [36] utilisent cette approche et proposent des solutions numériques au problème $2D$, validées par un calcul $3D$ sur les régimes les plus accessibles ($Re = 700$). Les effets 3D sont en effet d'autant plus importants que le nombre de Reynolds est important et amènent une instabilité transverse qui dégrade les rouleaux issus de l'instabilité de Kelvin Helmholtz à l'interface. Les auteurs retrouvent une symétrie dans le développement des fronts et concluent qu'un calcul 2D avec conditions de glissement est suffisant pour générer des intrusions ayant une géométrie en accord avec les connaissances théoriques sur leur évolution.

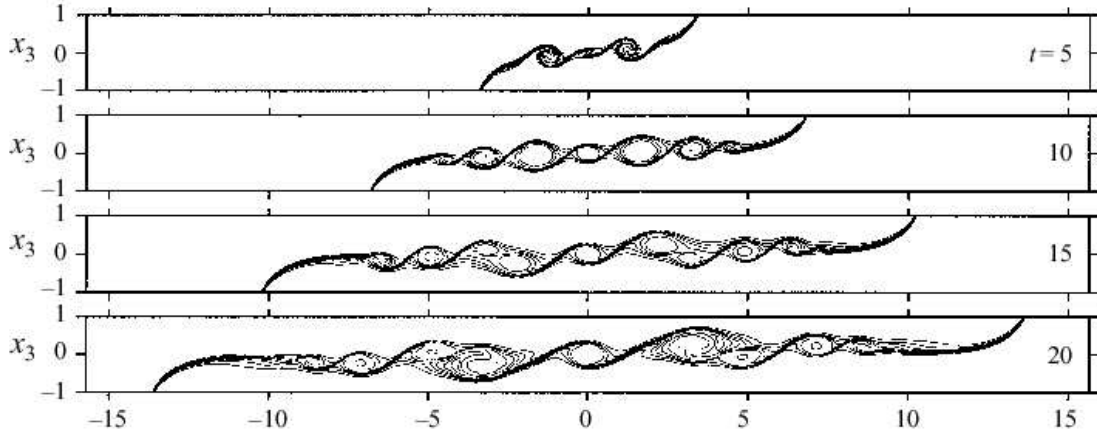


FIG. 7.1: Etude par une méthode spectrale, $Gr\ 1.2510^6$ [36]

Les temps adimensionnels sont obtenus grâce à h_f , la demi-hauteur du compartiment, et v_0 sont respectivement la longueur et la vitesse d'adimensionnement servant à l'obtention des équations de Boussinesq, propres aux auteurs.

$$t = \hat{t} \frac{h_f}{v_0} \quad (7.2)$$

En sortant de cette hypothèse $\gamma \sim 1$, BMM [8] retrouvent une asymétrie dans le développement des fronts. Avec l'idée de vérifier la théorie de (LRL) [53] sur la présence ou non d'un ressaut lors du développement du front d'intrusion dense, BMM reprennent l'étude pour des rapports de densités décrivant des régimes plus divers $\gamma \neq 1$. ($\gamma = 0.998, 0.92, 0.7, 0.2$).

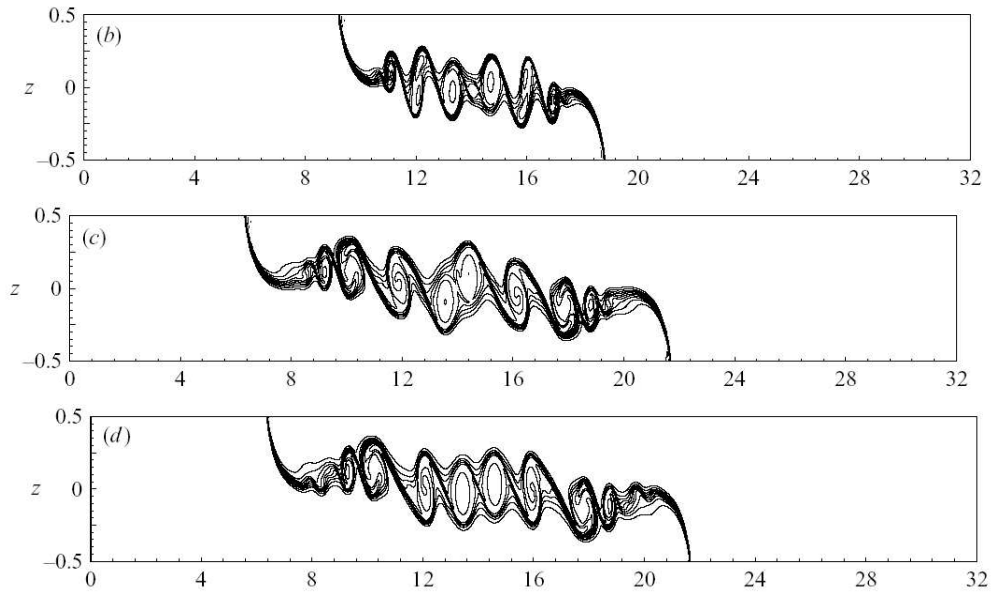


FIG. 7.2: Etude par une méthode spectrale $\gamma = 0.998$ $\hat{t} = 10, 16$ [8] et $\hat{t} = 16$ [36]

La figure (7.2) montre que dans le cas Boussinesq où $\gamma = 0.998$, la comparaison à Härtel & al. est correcte, et doit a priori valider l'approche.

Ces études sont réalisées sur des maillages réguliers avec une modélisation numérique purement eulérienne. Elles constituent une référence en qualité de calcul hautement résolu, mais leur haut niveau de discrétisation incite à étudier le comportement d'autres approches sur des résolutions similaires.

En choisissant de réaliser, pour la partie hyperbolique des équations, le transport par la méthode des caractéristiques, Etienne & al. [27] étudient le phénomène en procédant à une reconstruction d'interface. La résolution est semi-lagrangienne.

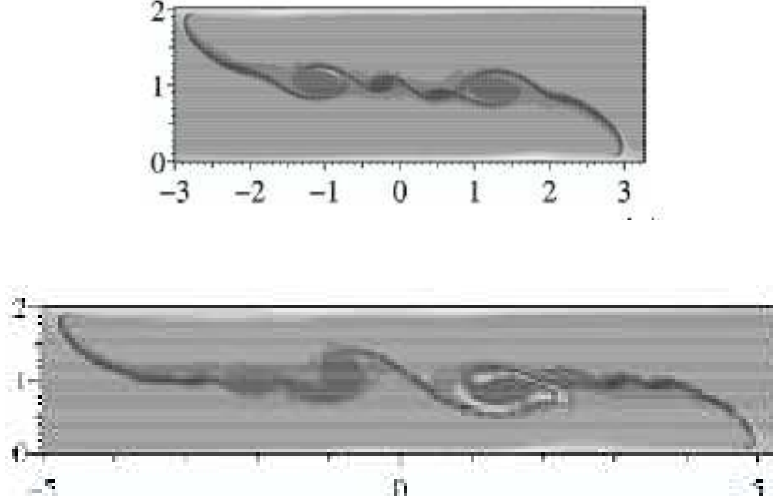


FIG. 7.3: Etude par une méthode Eléments Finis avec remaillage de l'interface $\gamma = 0.9$ (1) $\hat{t} = NC$ [27]

Pour optimiser le coût calcul de la discrétisation, les auteurs utilisent un mailleur automatique (*BAMG*). Une méthode des Elements Finis est utilisée pour évaluer le reste des équations.

Les auteurs traitent les équations dans un cadre général pour les valeurs de γ proposées par Gröbelbauer [34]. Les résultats numériques sont en accord avec l'expérience, et retrouvent le développement d'instabilités symétriques.

7.1.2 Avec SPH

Un troisième formalisme pour suivre cette interface existe avec une méthode lagrangienne comme SPH. Celle-ci doit pouvoir gérer par son seul formalisme, sans ajout d'équation, le mouvement de l'interface. Ce schéma, qui n'est donc pas du tout TVD, écarte l'inconvénient de la diffusion numérique de la discontinuité. La méthode s'apparente alors à du Shock-Capturing grâce au caractère conservatif de la méthode. SPH admet des solutions discontinues en densité sur le domaine par construction.

Dans la littérature ayant trait à SPH, ce type d'expérience a déjà été étudié par Monaghan & al. [62], comme validation d'une étude expérimentale. La gamme des régimes décrits est $\gamma = 0.714, 0.709, 0.857$ et la stabilisation du calcul, point clé du problème, y est décrite de manière succincte. C'est vraisemblablement la diffusion de Von Neumann, vue en [2.6], qui été utilisée pour stabiliser le calcul sans être précisément réglée pour reproduire la dissipation présente dans le phénomène.

De nombreuses questions demeurent donc sur le comportement, et la simulation, des fronts des intrusions. L'intérêt de ce domaine d'investigation pour SPH est, en premier lieu de tester la méthode sur un cas référencé expérimentalement, et qui est désigné en outre comme le type d'application privilégié de la méthode. L'existence de références numériques complète le travail de validation envisagé et permet d'exposer les forces et les faiblesses de SPH par rapport aux méthodes académiques de simulation numérique.

7.1.3 Perspectives

Sur le problème du "Lock Exchange" décrit en introduction de partie, on veut pouvoir retrouver avec la méthode SPH les formes des intrusions ainsi que le nombre de Froude qui leur est rapporté.

Outre obtenir une description correcte du mouvement inertiel induit, il faut aussi impérativement maîtriser la sensibilité aux instabilités physiques présentes. C'est en partie la condition limite imposée à l'interface qui crée cette instabilité, par ailleurs amplifiée par le rapport de densité. En supposant que le transport lagrangien gère l'évolution de la couche de mélange de manière satisfaisante compte-tenu du phénomène étudié, la diffusion des espèces n'est donc pas modélisée par une équation propre mais par le formalisme en considérant un nombre de Schmidt nul.

Il reste donc à cerner quelles sont les limites qu'ont rencontré les auteurs cités précédemment, et conclure sur le comportement de SPH dans ces cas de figures.

7.2 Modèle monofluide

En utilisant le modèle discret (3.1), on va entreprendre une modélisation du phénomène en raisonnant sur deux espèces distinctes $k = 1, 2$. Les particules du domaine sont donc d'une espèce ou d'une autre, avec des propriétés différentes, mais le formalisme s'y applique de la même manière qu'en partie II.

Les constituants déterminent le cours du phénomène via leur viscosité dynamique μ_k , et leur densité ρ_k . Pour chaque phase, une viscosité cinématique ν_k est ainsi facilement

interprétable :

$$\nu_k = \frac{\mu_k}{\rho_k}$$

Les simulations ont été réalisées avec des variables dimensionnées, mais pour interpréter les nombres adimensionnels de ces calculs, il a fallu fixer un choix pour les différentes grandeurs. Si on considère les équations pour une particule quelconque d'espèce k :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{\nabla} = H^{-1} \hat{\vec{\nabla}}, \quad \Delta = H^{-2} \hat{\Delta} \\ \rho_k = \rho_{k_0} \hat{\rho}_k \\ \vec{v} = v_0 \hat{\vec{v}} \quad \text{avec} \quad \left\{ \begin{array}{l} v_0 = \rho^* \sqrt{gh_f} \\ \rho^* = \sqrt{\frac{(\rho_d - \rho_l)}{(\rho_d + \rho_l)}} \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (7.3)$$

v_0 est la vitesse de flottabilité induite par la différence de densité entre les constituants. Les quantités H et v_0 induisent, par l'intermédiaire de (7.2), une échelle de temps sans dimension pour l'écoulement. A chaque phase est associée un nombre de Reynolds "propre", du fait des deux viscosités cinématiques existant dans le domaine.

$$Re_k = \frac{v_0 H}{\nu_k}$$

7.2.1 Equations du problème sans dimension

La densité ρ_k de l'espèce a , on l'a vu, une incidence sur le dimensionnement, par conséquent, dans l'équation de conservation de matière et l'équation de conservation de quantité de mouvement, elle est bien spécifiée avec l'indice lié. Pour une particule quelconque :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\hat{\vec{r}}}{dt} = \hat{\vec{v}} \\ \frac{d\hat{\rho}_k}{dt} = -\hat{\rho}_k \hat{\vec{\nabla}} \cdot \hat{\vec{v}} \\ \frac{d\hat{\vec{v}}}{dt} = -\frac{\delta}{M^2} \frac{\hat{\vec{\nabla}} \hat{p}_k}{\hat{\rho}_k} + \frac{1}{Re_k} \hat{\Delta} \hat{\vec{v}} + \frac{1}{(\rho^*)^2} \frac{1}{Fr^2} \vec{e}_0 \end{array} \right. \quad (7.4)$$

Le milieu est supposé incompressible. Comme dans la partie II, on raisonne sur une hypothèse de fluide quasi-incompressible en conservant la loi d'état (1.17) pour l'espèce k :

$$\hat{p}_k = p(\hat{\rho}_k) \quad \text{avec} \quad p(\rho_k) = p_{k_0} + (c_{k_0})^2 [\rho_k - \rho_{k_0}] \quad (7.5)$$

L'effet de compressibilité reste quantifié par le nombre de Mach M , et on règle la vitesse du son tel que $\delta/M^2 \sim 1$, comme vu en section [2.8].

7.2.2 Présence de turbulence

Les références que nous avons décidé de suivre décrivent des régimes qui s'inscrivent hors cas laminaire, tant au plan expérimental, qu'au niveau de la simulation numérique. A chaque cas est associé un nombre de Reynolds, trop important pour négliger la présence de turbulence. Expérimentalement, on a :

Auteur	Gröbelbauer & al.	KC. & al.	LRL & al.	Shin & al.
Re	4800-10 ⁵	1800-5500	10 ⁴ – 1.1 10 ⁵	4800 – 10 ⁵

Nombre de Reynolds atteints par les différents auteurs dans [34] [44] [53] [77].

Il s'ensuit que lors de la simulation, il faut pouvoir éventuellement rendre compte de la turbulence développée, qui est non linéaire et a une incidence plus importante aux grandes échelles d'espace.

Les instabilités générées par le phénomène déclenchent la turbulence, ce qui ne signifie pas pour autant qu'elle a une influence déterminante sur l'ensemble du phénomène. Ces instabilités vont apparaître à différentes échelles d'espace, puis se coupler pour se diffuser dans l'écoulement. Si on veut décrire cette évolution, on peut soit capter la plus petite des échelles, et discrétiser en conséquence, c'est de la Simulation Numérique Directe (DNS), soit utiliser des modèles de turbulence, type LES.

Les modèles de turbulence décrivent ces couplages en considérant les contraintes visqueuses à l'aide d'un champ de vitesse, somme d'un champ moyen et d'un champ fluctuant. Ainsi les instabilités, qui constituent des fortes variations locales de vitesse, se manifestent dans l'écoulement et génère la turbulence. La diffusion de ces instabilités, grâce au modèle décrit, assure la bonne marche du calcul en oeuvrant sur des maillages moins exigeants que si l'on suit les critères donnés par la DNS.

Avec au mieux 30 points dans la hauteur, ce qui constitue un maillage assez grossier, Gröbelbauer & al. utilisent un modèle $k - \epsilon$. Leur simulation a vraisemblablement diffusé numériquement à une grande échelle et fourni un nombre de Re très en deça de celui de l'expérience.

Auteur	Gröbelbauer & al. (<i>Phoenix</i>)	Härtel & al. (DNS/Spectral)	Birman & al. (DNS/Spectral)	Etienne & al. (DNS/E.F.)
Re	Non Communiqué	120 – 32000	1000-12000	4800 – 1.2 10 ⁵

Nombre de Reynolds atteints par les différents auteurs dans [34] [36] [8] [27].

Réaliser une simulation avec la méthode SPH, en suivant les critères suivis par les auteurs ayant travaillé en DNS, ne garantit pas non plus le niveau de précision attendu pour leur résultats. La méthode est en effet moins précise qu'une méthode spectrale. Il faut s'attendre à des résultats moins performants, à résolution en maillage équivalente.

A de grands nombres de Re , la méthode va présenter un avantage, celui de l'usage d'un champ de transport pour le calcul de la densité dans l'équation de continuité. Le champ de vitesse utilisé est la somme d'un champ de vitesse local moyen et du champ de vitesse ponctuel, décrit en (2.4.3). Son usage permet, en partie, de manifester le couplage entre des instabilités d'échelles diverses, en s'apparentant sur le principe à la stabilisation numérique obtenus avec les modèles de turbulence.

7.3 Mise en oeuvre numérique avec SPH : Equation d'Euler

Les références expérimentales des cas étudiés indiquent que dans l'équation du mouvement de (7.4), le terme de diffusion est négligeable devant celui lié au gradient de pression. Une modélisation du phénomène par les équations d'Euler peut trouver un sens si on sait utiliser une diffusion numérique à bon escient.

Son utilisation ne doit avoir d'intérêt dans la simulation que pour décentrer le schéma. En effet, la simulation de courants de densité avec SPH va nous confronter aux traitement de deux types d'instabilités :

- Les habituelles instabilités numériques de pression, liées au fait que SPH calcule vitesse et pression sur les mêmes points, ce qui génère des ondes numériques instables, de plus amplifiées par l'utilisation de schémas centrés. Ces oscillations sont usuellement supprimées par un lissage de la pression via un moyennage de la densité par des fonctions de Shepard (2.92).
- Les instabilités physiques : Il a été vu dans l'introduction que ce sont les phénomènes de diffusion qui sont responsables de l'évolution de l'interface. Il faut considérer le mélange des espèces pour les gaz et des phases pour les fluides, et la diffusion turbulente dans le sillage du front dense.

Vu la faiblesse des viscosités en jeu, la simulation est réalisée en considérant des conditions de glissement aux parois, et la continuité des vitesses à l'interface. Les couches limites dynamiques aux parois existent mais se développent sur des échelles négligeables, sans influence sur la dynamique globale du front. En effet, le cas étudié devient indépendant du nombre de Re mais seulement à partir de $Re = 15000$ en cas de glissement [36].

7.3.1 Choix du schéma

En utilisant les valeurs du coefficient de diffusion ν de [34] pour dimensionner l'amplitude de la diffusion numérique, deux schémas ont été écartés, $(\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla})$ et Π_{ij} . Un schéma nouveau a été proposé et testé pour réaliser l'étude.

Le schéma $(\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla})$ utilisé dans la partie II est repris avec l'usage d'un gradient renormalisé pour calculer la divergence du tenseur des contraintes visqueuses. Mais ce terme, validé dans le cas unidirectionnel de Poiseuille, est apparu instable à la mise en oeuvre pour les courants de densité.

Cette conclusion sur sa stabilité a été tirée suite à des tests réalisés avec la viscosité de VonNeumann Π_{ij} . Sur des régimes équivalents, celle-ci agit correctement. En effet, la viscosité numérique de VonNeumann (ou de pression) Π_{ij} induit, on l'a vu précédemment, une dissipation numérique avec un coefficient de diffusion équivalent à $\nu_{num} \equiv \alpha h$. Pour la discrétisation utilisée avec $(\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla})$, on remarque que pour des valeurs de α comprise entre 0.03 et 1, elle assure des simulations stables. Pour les valeurs de ν_{num} correspondantes, le terme $(\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla})$ conduit à la divergence du calcul, il est donc écarté.

Avec le terme Π_{ij} , à nombre de Mach bien déterminé pour le phénomène, c'est-à-dire à célérité fixée, et pour une valeur de α minimale, il ne reste que le paramètre h que l'on peut régler pour assurer $\nu \simeq \alpha h$.

La vitesse des ondes de gravité est \sqrt{gH} . On va prendre $c = 10\sqrt{gH}$, $\alpha = 0.03$, $H = 0.3$, et donc $\nu_{num} \simeq 0.16h$. Or les valeurs de ν requises sont de l'ordre de 10^{-4} . Le terme Π_{ij} doit donc bénéficier d'une discrétisation fine pour diffuser sans masquer la physique. Ainsi, l'intérêt de ce terme, stabiliser simplement le schéma sans induire de dissipation physique, est perdu plus puisqu'il requiert lui aussi un pas de discrétisation fin.

Une autre solution est à trouver, la meilleure étant de trouver un schéma adéquat pour le phénomène. Compte tenu des résultats de (2.6), nous n'avons pas utilisé les différentes formes hybrides qui mêlent différences finies et gradient du noyau, mais plutôt choisi de proposer un terme qui soit consistant et stable dans tous les cas. C'est la forme PSE renormalisée décrite en première partie (2.85).

7.3.2 Marche en temps

Compte tenu des régimes décrits dans la section [7.2.2], pour la marche en temps, c'est la condition de stabilité acoustique qui va gouverner la simulation. Une approche explicite semblable à celle décrite dans la section [3.3] se justifie donc à la mise en oeuvre. Les calculs sont réalisés en respectant les conditions CFL de diffusion des deux fluides, c'est à dire en suivant celle du plus léger, les viscosités dynamiques étant considérées égales.

7.4 Conclusion

En considérant la dissipation présente dans le phénomène à l'aide du schéma PSE renormalisé sur une discrétisation adéquate, et en stabilisant les instabilités numériques de pression par un lissage des valeurs, on doit pouvoir simuler correctement certains des cas expérimentaux de la littérature.

Pour faire une distinction avec les différents modèles développés dans la suite, on dénommera l'approche qui vient d'être présentée comme "*monofluide*" puisque chaque particule ne porte les propriétés physiques que d'un seul milieu.

Chapitre 8

Approche monofluide

8.1 Objectifs

Pour comparer la méthode SPH aux méthodes académiques décrit dans l'introduction de cette troisième partie, on mène une campagne de simulations, identique à celle réalisée par Etienne & al. [27] sur les résultats expérimentaux de Gröbelbauer & al. [34]. On veut ainsi observer si SPH permet de simuler correctement la dynamique du problème posé, en se comparant aux résultats de la littérature, renseignant sur les nombres de Froude et la forme des intrusions.

Pour déterminer les vitesses de fronts nécessaires lors du post-traitement à l'obtention des nombres de Froude, certains auteurs utilisent une interpolation locale du champ de vitesse [27]. Dans [8], BMM cherchent le lieu où est vérifié :

$$\rho = \frac{\gamma + 1}{2} = \frac{\rho_d + \rho_l}{2\rho_d}$$

et en interprète une vitesse moyenne. Il est connu que dans le phénomène, la vitesse est uniforme au cours du temps. Ce raisonnement est donc fondé.

Dans notre étude, nous avons simplement défini la vitesse du front comme celle de la particule à la fois la plus avancée dans le front observé, et la plus proche de la paroi solide. En effet, le formalisme représente le milieu par des particules mobiles, mais c'est la vitesse du front qui nous intéresse, et on cherche à l'évaluer en repérant sa position sur le volume de contrôle adéquat à chaque instant de mesure.

Pour reproduire le phénomène expérimental, on considère les expériences numériquement avec les quantités de fluide du dispositif (6.1). Les intrusions de fronts légers sont déclenchées avec la configuration dense/léger, et les intrusions de fronts denses avec une configuration léger/dense.

8.2 Discrétisation initiale

Pour déterminer le nombre de points à mettre en hauteur, on s'est d'abord inspiré du raisonnement conduit sur la diffusion numérique en section [7.3.1]. Avec 30 points en hauteur, $h = 0.012$, $\nu_{num} \sim 0.002$ ce qui correspond à 100 fois la viscosité physique. Cette ordre de résolution est trop grossier. Il faudrait donc monter en résolution pour diffuser numériquement à un ordre de précision inférieur ou égal à la dissipation physique du phénomène. Avec 120 points en hauteur, on a $h = 0.003$, $\nu_{num} \sim 0.0005$.

Cet ordre de grandeur semble encore trop important par rapport à la diffusion physique mais peut être considérée comme étant une échelle d'espace suffisante pour décentrer les schémas.

En effet, pour cette première étude, on a supposé que la diffusion, passé un certain seuil avait peu d'effet sur le déroulement des intrusions. Ainsi, pour fixer un choix pour la première campagne de simulation, qui ne soit pas trop lourd à la mise en oeuvre, on considère qu'avec 120 points, le coefficient de diffusion cinématique n'est pas abberant pour rendre compte du phénomène.

Les particules sont distribuées de manière à respecter une progression géométrique et sont affectées d'une densité satisfaisant l'équilibre hydrostatique du milieu. Le nombre de particules a été fixé dans chaque cas à 7156 ce qui correspond à 120 particules en hauteur. Pour des économies d'opérations, on ne s'intéresse au mouvement de l'interface que sur

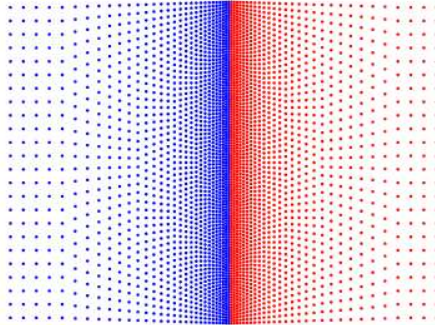


FIG. 8.1: Distribution raffinée à l'interface

la durée où celle-ci se propage le long de la paroi. Le domaine a donc été tronqué pour la simulation, et défini par les abscisses qu'aucun point du front n'aura parcouru pendant la durée du calcul. Cette approche a été justifiée sur un exemple en SPH et vérifiée avec *FLUENT* [81]. Le phénomène n'est pas altéré si on considère que le domaine situé loin du front n'a pas d'influence sur le mouvement de l'interface.

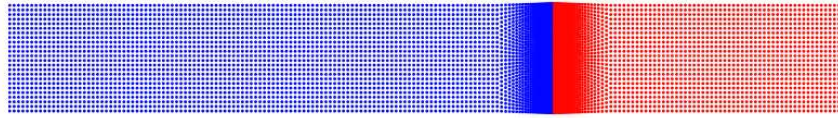


FIG. 8.2: Domaine global avec distribution raffinée

Compte tenu des conditions initiales, il faut évidemment raisonner en considérant h variable pour garantir la bonne tenue des calculs. Pour cette série de cas, les simulations ont été réalisées sur un PC 2,4Ghz, avec une durée moyenne de calcul avoisinant une centaine d'heures.

La plupart des calculs ont rencontré des problèmes algorithmiques. La présence de particules de tailles différentes affecte la détection des voisins après un certain nombre pas de temps. Un autre artefact numérique existe, une partie des particules fines se collant aux parois.

Toutefois, les temps considérés pour obtenir les nombres de Froude permettent de conclure sur le phénomène, puisque les front parcourent au moins la distance nécessaire pour atteindre la paroi la plus proche.

8.3 Ecoulements d'échange [34] :

Article soumis au Congrès Français de Mécanique 2005

La finalité du calcul numérique sur ce problème est de modéliser le comportement du front, et décrire sa géométrie. Ici, la résolution prise en compte est trop grossière pour prétendre donner des indications sur le développement des rouleaux induits par l'instabilité de Kelvin-Helmoltz. Toutefois on constate, à l'interface entre les fluides, qu'il y a formation de structures, même avec peu de points.

Pour différencier les régimes suivant les ratios de densité, plusieurs notations sont utilisées dans la littérature. Un tableau récapitulatif donnant les valeurs correspondantes est donné en annexes.

Dans la suite, les intrusions de front dense sont désignées Dense Gas Intrusion (DGI) et les intrusions de front léger Light Gas Intrusion (LGI).

8.4 Comparaison à une approche VOF : FLUENT

Parmi les cas tests présentés plus haut, le groupe de travail SPH a été mis à contribution pour observer le comportement de la méthode sur trois cas. En complément, l'IFP a produit une étude avec FLUENT, approche Eulerienne type Front Tracking avec le schéma VOF. Pour cette étude, une condition limite d'adhérence a été considérée aux parois.

Les cas tests choisis décrivent trois rapports de densité selon des paramètres décrits dans la note technique présente en annexe. La géométrie du domaine est identique à celle utilisée dans [8.3], ainsi que les viscosités des milieux. L'intérêt de cette étude est d'observer les résultats proposés par un code industriel, et de vérifier aisément certaines hypothèses.

Cas $\gamma = 0.72$ / $\rho^* = 0.228$

En suivant deux approches pour la résolution spatiale 2D et 3D, le cas le plus proche du régime de Boussinesq est considéré. On retrouve la génération asymétrique d'instabilités, attendue, dans l'écoulement :

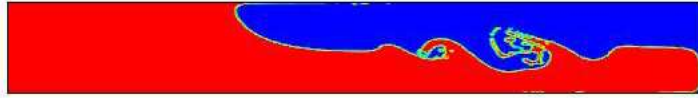


FIG. 8.3: Cas Fluent 2D $\gamma = 0.72$, $t=1.9s$

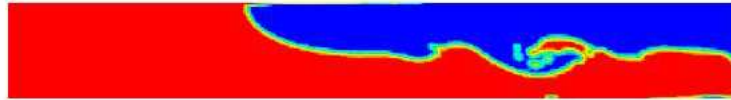


FIG. 8.4: Cas Fluent 3D $\gamma = 0.72$, $t=1.9s$

On constate bien la formation d'instabilités à l'interface, suivant le même déroulement dans les deux cas 2D et 3D. Les deux intrusions se partagent le compartiment à mi-hauteur, comme prédit dans la théorie conservatrice d'énergie de Benjamin.

Pour conclure avant que les fronts aient atteint les parois, on établit pour ces intrusions des nombres de Froude équivalents à des dates antérieures à celle des profils présentés. Autour de la date $t = 1.5s$, les valeurs obtenues sont $Fr_d = 0.34$ et $Fr_l = 0.33$.

Cas $\gamma = 0.14$ / $\rho^* = 0.87$

Pour voir la sensibilité au nombre de Reynolds, on multiplie par 100 la viscosité requise par la note technique dans l'écoulement. Le nombre de Reynolds induit reste caractéristique toutefois d'un écoulement turbulent.

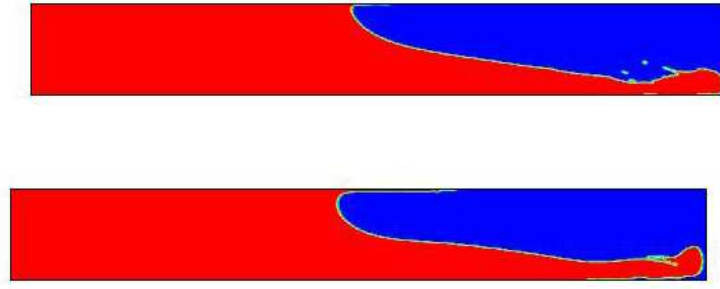


FIG. 8.5: Cas $\gamma = 0.14$, $t = 0.55s$ avec la viscosité de [34], et une valeur 100 fois supérieure

Les positions des fronts légers sont les mêmes dans les deux cas. Ce calcul semble confirmer que la viscosité n'intervient pas de façon notable sur la vitesse du front léger. Dans le premier cas, à la date $t = 0.55s$, les nombres de Froude équivalents sont $Fr_d = 1.32$ et $Fr_l = 0.744$.

Cas $\gamma \rightarrow 0$ / $\rho^* \rightarrow 1$

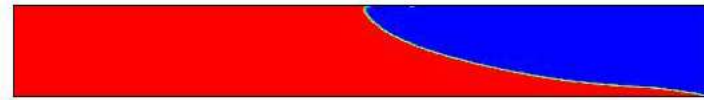


FIG. 8.6: Cas Fluent 2D $\gamma \rightarrow 0$, $t = 0.38s$

A la date considérée pour le résultat présentée, les nombres de Froude équivalents sont éloignés des valeurs attendues. On a donc préféré réaliser la comparaison à une date antérieure, $t = 0.26s$, qui propose $Fr_d = 1.53$ et $Fr_l = 0.76$.

8.5 Commentaires sur les résultats obtenus

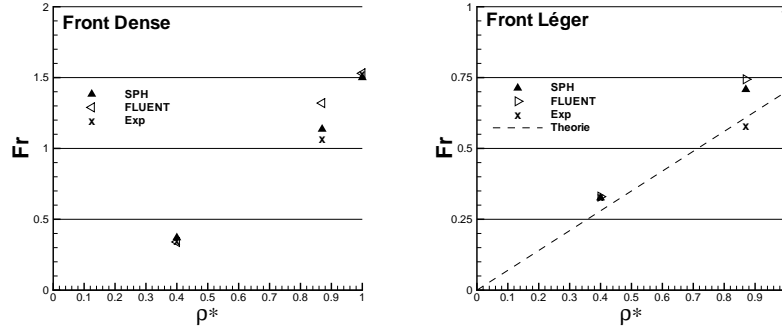


FIG. 8.7: Nombre de Froude obtenus par l'expérience, par SPH-Euler-monofluide et par FLUENT.

L'effet des parois latérales sur l'évolution des vitesses de front n'est pas connu, et semble d'après les calculs FLUENT avoir une importance. Les simulations réalisées proposent des résultats qui ne vérifient donc pas l'invariance en temps des vitesses de front, mais sont toutefois relativement proches de celles prédites par la loi de corrélation proposée par Gröbelbauer & al.

Par ailleurs, les simulations menées étant immiscibles, l'information fournie par le calcul sur l'évolution de l'interface ne correspond pas au phénomène recherché, ni à l'expérience réalisée.

Avec SPH-Euler-monofluide, les courants de densités simulés ont permis de vérifier les valeurs des nombres de Froude des phénomènes étudiés. Mais elles se sont déroulées sans décrire convenablement l'évolution du phénomène, et en restant trop instable pour atteindre l'équilibre final. Il existe un transfert de quantité de mouvement entre les fluides au cours de l'écoulement que l'on n'a pas su modéliser et qui doit intervenir à des échelles non simulées ici. En conséquence, il faut repenser les critères de discrétisation.

Une première étape est de trouver une solution au maillage raffiné qui ne convient pas sur le temps du phénomène. Un remaillage est nécessaire. Dans cet esprit, l'utilisation d'un mailleur semi-industriel a été tenté mais n'a pas donné de bonnes solutions (ECN [24]). La perspective la plus sûre est donc de travailler avec des résolutions qui considèrent les échelles de la diffusion. Ainsi, il est possible de contrôler tous les types d'instabilités intervenant dans le domaine.

8.6 Comment capter les échelles de diffusion présentes à l'interface ?

En l'absence de modèle macroscopique efficace, c'est donc en introduisant une diffusion physique aux échelles associées, que l'on peut décentrer efficacement les schémas pour stabiliser les équations.

Pour travailler avec des niveaux de discrétisation fiables, préconisées dans la littérature, il faut que la discrétisation soit convergée, c'est à dire qu'ajouter plus de points n'apporte pas plus d'information. Ainsi, pour envisager correctement la simulation d'écoulements à grands nombre de Re , une dizaine de points au minimum doivent être considérés pour capter les couches limites diffusives.

Dans une simulation dissipative visqueuse (faible Re), à l'instant τ , la couche limite de cisaillement matérialise un gradient de vitesse et a pour épaisseur $\sqrt{\nu\tau}$ où ν est le coefficient de diffusion visqueux. Par conséquent, on peut régler le pas de discrétisation initial pour avoir à la date τ assez de points dans la couche limite, et reproduire correctement les échelles en jeu. C'est le cas préconisé par Härtel & al. [36] :

$$e = \sqrt{\nu\tau} = \frac{H}{\sqrt{Re}} \quad (8.1)$$

et on va donc régler la taille initiale d'une particule avec le critère :

$$\|\vec{r}_0\| = 0.1 \sqrt{\nu\tau} = \frac{H}{10 \sqrt{Re}} \quad (8.2)$$

Exemple :

Au temps $\tau = 5s$, si $\nu = 10^{-5} m^2.s^{-1}$ alors $e = 7.10^{-3}m$. et il faut respecter $\|\vec{r}_0\| \leq 10^{-4}$ si l'on souhaite décrire la couche limite d'épaisseur e avec une dizaine de points.

Réciproquement, l'utilité de ce type d'analyse adimensionnelle pour les numériciens est de pouvoir interpréter la validité d'un calcul sur un régime souhaité, ou quel régime un calcul peut réellement signifier.

8.7 Conclusion

La simulation de courants de densité ne peut pas être réalisée avec une modélisation par les équations d'Euler monofluide. Le phénomène met en jeu plusieurs effets, mal décrits par les modèles physiques et générateurs d'instabilités. Ainsi les ondes de gravités induites par le rapport des densités en présence, la diffusion turbulente, la diffusion des espèces agissent à des échelles de temps et d'espace que les théoriciens ont des difficultés à cerner.

Avec une résolution raffinée localement, on a pu mener des calculs sans ajouter de viscosité numérique et retrouver sur des temps courts les résultats attendus. Il paraît probable que les simulations réalisées n'ont pas considéré la dissipation physique existant dans l'écoulement considéré, ce qui n'a pas eu d'incidence sur l'établissement des bouffées et de leur vitesse d'intrusion. Cette stabilité relative que l'on a pu conserver tout le calcul est liée à l'utilisation d'un schéma adapté au problème. C'est la forme PSE renormalisée.

Le raffinement local de la discrétisation a posé des problèmes sur des durées où la distribution des particules a été fortement modifiée par le phénomène. En outre, l'utilisation d'un pas de temps global a fait évoluer chaque particule avec un pas de temps sous-évalué pour des conditions de stabilité, ce qui conduit à un calcul mal optimisé. Dans une perspective où on poursuivrait les simulations avec ce type de discrétisation, il faudrait, pour améliorer l'approche, développer deux aspects de la méthode. Le premier serait l'utilisation d'un pas de temps local, type algorithme "verlet". Le second serait la reconstruction d'un domaine raffiné au niveau de l'interface, adapté à la disposition spatiale de la frontière à la date considérée. En projetant de manière conservative, à l'aide de fonctions de Shepard, les champs physiques associés, la reprise de la simulation pourrait mener à des calculs performants. La condition pour mener un tel développement est d'avoir à disposition un cas de référence, mené avec le formalisme SPH et validé avec une distribution régulière.

A cet effet, pour réaliser des calculs plus stables et rendant compte de manière plus précise de la structure des bouffées, on va respecter un critère de discrétisation adapté aux échelles des phénomènes se déroulant à l'interface, mais pour tout le domaine discret. Ce critère a un coût important, mais doit assurer un résultat fiable.

Il reste que le modèle choisi fait que la description de l'interface est grossière. Le fait de ne pas considérer de tension interfaciale, ni de diffusion de matière, laisse le mouvement lagrangien des particules agir comme un effet de mélange non dimensionné, et probablement physiquement équivalent à un nombre de Schmidt infini. Pour maîtriser cet effet, il faut traiter la diffusion d'espèce comme une équation à part entière.

C'est le problème étudié dans le dernier chapitre.

Chapitre 9

Approche bifluide

La série de simulations réalisée dans le chapitre précédent ne décrit pas de manière pleinement satisfaisante les écoulements d'échange étudiés. Les calculs développent numériquement des instabilités avant d'avoir atteint la phase d'équilibre dynamique du phénomène. En outre, en se référant à [7.1.1], ils ne permettent pas de retrouver les formes des intrusions prédites par la théorie, partiellement décrites par l'expérience et retrouvées par les calculs d'ordre élevé de la littérature.

Dans le cas présent, le formalisme utilisé a été constaté comme inadapté car il ne propose pas de description satisfaisante des conditions à la frontière entre les milieux. Pourtant, lorsqu'elle est amenée à simuler des écoulement de surface libre en monophasique, la méthode SPH génère une tension de surface numérique qui agit de façon physiquement stabilisatrice sur le système. On le constate particulièrement à l'interface, comme si le formalisme SPH traitait le vide comme un milieu à part entière.

Mais cet effet ne permet pas de traiter directement la diffusion d'espèces intervenant dans certains cas. Par conséquent, pour traiter l'interface fluide-fluide caractérisée par le développement de rouleaux induits par l'instabilité de Kelvin Helmholtz, il faut simuler le modèle physique complet. On peut ainsi compenser l'effet d'un mélange crée par le mouvement lagrangien à l'interface.

Pour prendre en compte le mélange des espèces, on va considérer la particule SPH comme constituée de deux espèces, en équilibre de pression. C'est le modèle bifluide développé dans la thèse de G. Chanteperdrix [15], et décrit dans la première partie [1.4]. Physiquement, il peut être retrouvé par un raisonnement thermodynamique. Mathématiquement, lorsqu'il est associé aux lois d'état adéquates, telle (1.17), il assure un bon comportement pour la résolution numérique dans un grand nombre de cas.

Par rapport aux travaux de Chanteperdrix & al., notre étude considère qu'une diffusion entre les constituants est possible, régie par l'équation (1.51).

9.1 Modèle SPH bifluide

Par rapport à l'approche monofluide, un aspect fondamentalement différent de l'approche bifluide est la prise en compte de trois densités dans les équations, la densité globale équivalente ρ , et les densités partielles ρ_k .

Afin d'appliquer ce modèle aux écoulements d'échange, il faut définir initialement pour chaque constituant une fraction volumique ϕ_k non nulle, nécessaire au modèle :

$$\rho = \sum_k \phi_k \rho_k \quad (9.1)$$

Cette définition est délicate puisque l'on doit rendre compte de deux fluides distincts spatialement à l'instant initial, leur disposition étant celle de la figure (6.1).

9.1.1 Définition de la fraction volumique initiale

Dans la partie du domaine où le fluide "1" domine en présence, sa fraction volumique vaut sensiblement 1. On considère le petit paramètre $\epsilon = 10^{-6}$ pour construire le domaine initial. Supposer $\phi_1 = 1 - \epsilon$, et par conséquent $\phi_2 = \epsilon$, est une bonne description. De la même façon, dans la partie du domaine où domine le fluide "2", $\phi_1 = \epsilon$, $\phi_2 = 1 - \epsilon$.

Ces hypothèses permettent d'écrire la densité globale sous la forme :

$$\begin{cases} \rho = (1 - \epsilon)\rho_1 + \epsilon\rho_2 \simeq \rho_1 & \text{dans la partie "1"} \\ \rho = \epsilon\rho_1 + (1 - \epsilon)\rho_2 \simeq \rho_2 & \text{dans la partie "2"} \end{cases}$$

La valeur faible de ϵ signifie qu'à l'instant initial, aucun mélange n'est supposé exister, c'est-à-dire que chaque milieu a une densité identique à celle de la densité au repos du milieu dominant.

9.1.2 Modèle continu

Pour utiliser les équations du modèle bifluide décrit dans [1.4], le modèle (7.4) doit considérer deux équations de conservation sur les espèces ainsi qu'une hypothèse de volume de contrôle isobare.

$$p_1 = p_2 \quad (9.2)$$

La description qui suit ne cite pas l'équation de transport, qui reste inchangée. Les équations de conservation de l'écoulement en hypothèse d'écoulement diphasique miscible sont donc au nombre de trois pour chaque particule.

Avec des variables dimensionnées, ces équations sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt} (\phi_k \rho_k) + (\phi_k \rho_k) \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = \vec{\nabla} (\rho_k \vec{\nabla} Y_k) \quad k=1,2 \text{ les phases en présence} \\ \frac{d\vec{v}}{dt} = -\frac{\vec{\nabla} p}{\rho} + \vec{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau} + \vec{g} \end{array} \right. \quad (9.3)$$

Pour fermer le problème, on utilise la loi d'état (1.31), paramétrée pour que $\delta/M^2 \sim 1$:

$$p_k = p_{k_0} + (c_{k_0})^2 (\rho_k - \rho_{k_0}) = p_k \left(\frac{\tilde{\rho}_k}{\phi_k} \right) \quad (9.4)$$

Pour modéliser la diffusion des espèces, on fait l'hypothèse que dans la limite incompressible la diffusion dépend linéairement de la variation de sa fraction volumique.

$$\vec{\nabla} (\rho_k \vec{\nabla} Y_1) = \vec{\nabla} (\rho_k \vec{\nabla} (\frac{m_1 \phi_1}{m})) \simeq \rho_1 \kappa \Delta \phi_1 \quad (9.5)$$

et pour être conservatif par construction :

$$\vec{\nabla} (\rho_k \vec{\nabla} Y_2) = -\rho_1 \kappa \Delta \phi_1 \quad (9.6)$$

Pour simplifier le modèle, on reprend l'hypothèse de la partie *I* du document, où on a posé :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi_1 = \phi \\ \phi_2 = 1 - \phi \end{array} \right. \quad (9.7)$$

c'est-à-dire qu'on peut considérer que le domaine est caractérisé par une fraction volumique unique ϕ , distribuée sur tout le domaine, et discontinue à l'interface. Ainsi, on va conserver la possibilité pour le modèle de dégénérer vers une résolution monofluide en utilisant la réciprocity des flux (9.6) entre les espèces k .

Les deux équations de (9.3) sur la diffusion sont équivalentes à :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\rho}{dt} = -\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \\ \frac{d}{dt} (\phi \rho_1) + (\phi \rho_1) \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = \rho_1 \kappa \Delta \phi \end{array} \right. \quad (9.8)$$

Dans le cas monofluide, on ne résoudra que l'équation de conservation du volume globale. Dans le cas bifluide, les équations de (9.8) donnent ρ et $\phi \rho_1$, et on peut déduire $(1 - \phi) \rho_2$ par :

$$\rho = \phi \rho_1 + (1 - \phi) \rho_2$$

si on dispose d'une équation de fermeture. Ce sera l'équilibre des pressions (9.2), proposé et démontré en *I*, qui va satisfaire cette demande.

9.1.3 Approche numérique

Les équations discrètes sont décrites avec un schéma d'ordre 1 en temps pour alléger les notations. Lors de la mise en oeuvre, c'est le schéma RK2 qui a servi à mener les simulations. Les variables à déterminer sont $(\vec{r}, \vec{v}, \rho_1, \rho_2, \phi)$.

Diffusion des espèces

On choisit de fixer le nombre de Schmidt Sc de l'écoulement, et d'en déduire les coefficients de diffusivité des espèces pour les milieux, en fonction des cas considérés. Chaque particule a pour densité globale ρ , pour viscosité cinématique ν et pour coefficient de diffusion des espèces κ . Il est donné par :

$$\kappa = Sc \nu$$

Pour plus de simplicité, on note $\phi_1 \rho_1 = \tilde{\rho}_1$. Les équations de conservation à résoudre pour chaque particule i sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{r}_i^{n+1} = \vec{r}_i^n + \delta t \langle \vec{v} \rangle_i^n \\ \rho_i^{n+1} = \rho_i^n - \rho_i^n \delta t \langle \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \rangle_i^n \quad \text{avec} \quad \langle \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \rangle_i = \sum_{j \in D(i)} \omega_j (\vec{v}_j - \vec{v}_i) \cdot B_{ij} \vec{\nabla}_i W_{ij} \\ \tilde{\rho}_{1i}^{n+1} = \tilde{\rho}_{1i}^n - \rho_{1i}^n \kappa_i \delta t \langle \Delta \phi^n \rangle_i^{PSER} \\ \quad \text{avec} \quad \langle \Delta \phi^n \rangle_i^{PSER} = \sum_{j \in D(i)} \omega_j \frac{4}{C_i} \frac{\Theta'_{ij}}{\|\vec{r}_{ij}\| h_{ij}^3} \phi_{ij} \end{array} \right. \quad (9.9)$$

Pour que l'algorithme soit conservatif par construction, on déduit $\tilde{\rho}_{2i}$ par :

$$\tilde{\rho}_{2i}^n = \rho_i^n - \tilde{\rho}_{1i}^n$$

Equation de conservation de la quantité de mouvement

$$\vec{v}_i^{n+1} = \vec{v}_i^n - \delta t \left[\sum_{j \in D(i)} m_j \left(\frac{p_i^n + p_j^n}{\rho_i^n \rho_j^n} \right) B_{ij} \vec{\nabla}_i W_{ij} + \langle \Delta \vec{v}^n \rangle_i^{PSER} + \vec{g} \right] \quad (9.10)$$

Relaxation de la fraction volumique/ calcul de ϕ^{n+1}

Le modèle continu exige à toute date t_n , $p_1 = p_2$, qui peut s'écrire grâce à (9.4) comme une équation polynomiale du second ordre sur ϕ , voir section [1.4.2].

$$\frac{\tilde{\rho}_2 c_2^2}{\phi} - \frac{\tilde{\rho}_1 c_1^2}{1 - \phi} + \rho_{20} c_2^2 - \rho_{10} c_1^2 = 0$$

Sa racine physiquement admissible est connue par (1.46), vu en première partie.

Une deuxième expression reliant ρ_1 et ρ_2 est acquise, ce qui signifie que ces deux valeurs sont donc déterminées, via un calcul succinct.

A l'issue de ces étapes, dans le volume de contrôle représenté par la particule i , les deux milieux cohabitent en étant en équilibre de pression. L'algorithme n'impose la condition requise pour déterminer ϕ qu'après avoir effectué la diffusion des constituants. Dans ce sens, on peut considérer que la fraction volumique est relaxée au cours du calcul.

La validation de ce modèle peut être faite avec un écoulement immiscible sur un calcul de rupture de barrage, où un gain en stabilité est clairement établi. La miscibilité est alors réglée par un nombre de Schmidt infini.

Puis, dans un cas miscible, cette formulation est testée sur les cas précédemment étudiés de [34] pour voir les améliorations apportées par ce nouveau modèle.

9.2 Rupture de barrage, Solution de Ritter

La solution de Ritter présentée en début de partie est un moyen de comparer les méthodes, et de voir clairement l'apport de l'approche bifluide pour SPH en terme de stabilisation.

On considère un domaine fluide carré, initialement au repos, sous pression hydrostatique. Le milieu considéré est de l'eau, de densité $\rho = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$, et de viscosité nulle. La discrétisation est la même pour les deux approches, 100 particules en hauteur soit 10000 dans le domaine. Dans les deux cas un lissage du champ de pression à une fréquence qui correspond à tous les 100 pas de temps est réalisé. La condition limite imposée au fond est le glissement.

Usuellement, dans ce cas de figure, on décentre le schéma avec la viscosité de VonNeumann. Pour stabiliser efficacement dans le cas monofluide, les valeurs de α considérées doivent être comprises entre 0.1 et 1.

Ici, on confronte les solutions obtenues par SPH monofluide avec $\alpha = 0.1$, et SPH-bifluide avec $\alpha = 0.05$. Contre toute attente, la méthode monofluide est instable quand dans le même temps l'approche bifluide l'est. L'approche monofluide développe des instabilités que l'on peut remarquer à la surface libre. Elles vont faire diverger le calcul dans les pas de temps suivants.

Avec un lissage de la pression identique et une diffusion numérique deux fois plus faible, l'approche bi-fluide est stable, et propose un champ de pression en surface libre de meilleure qualité.

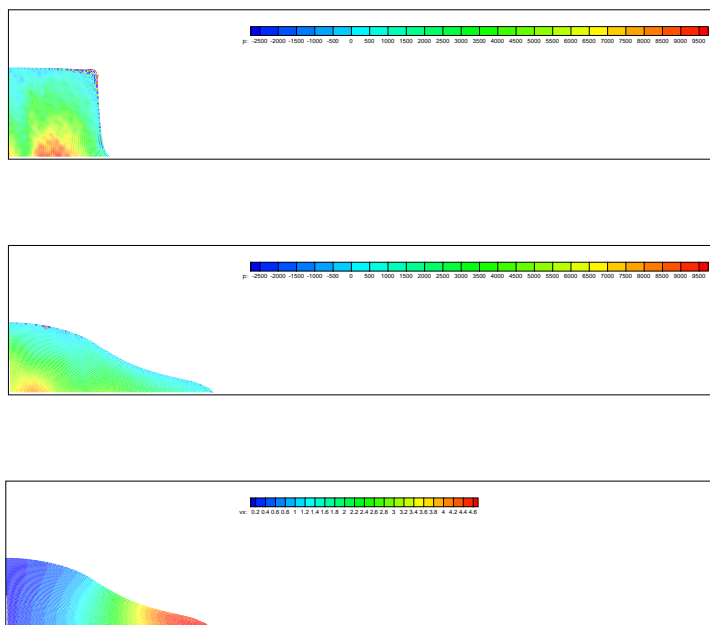


FIG. 9.1: Solution de Ritter obtenue avec SPH monofluide

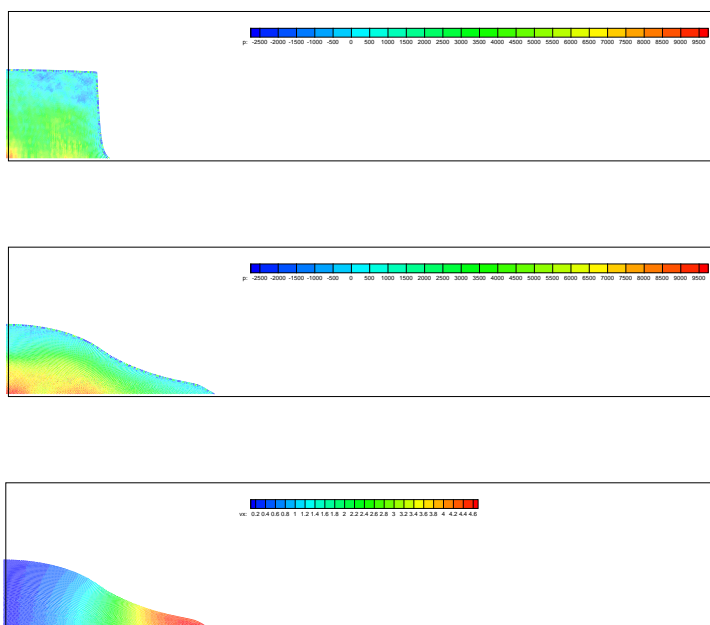


FIG. 9.2: Solution de Ritter obtenue avec SPH bifluide

Sur une durée pour laquelle le fluide s'écoule à l'infini, le calcul trouve une vitesse asymptotique proche de celle prédite par Ritter :

$$V_{\infty} = 2\sqrt{gH} \quad (9.11)$$

Pour le calcul considéré, ce modèle prédit donc $V_{\infty} = 6.26 \text{ m/s}$. Les résultats proposés par le calcul retrouvent un arrêt progressif du front, et une vitesse asymptotique proche de celle donnée par le modèle.

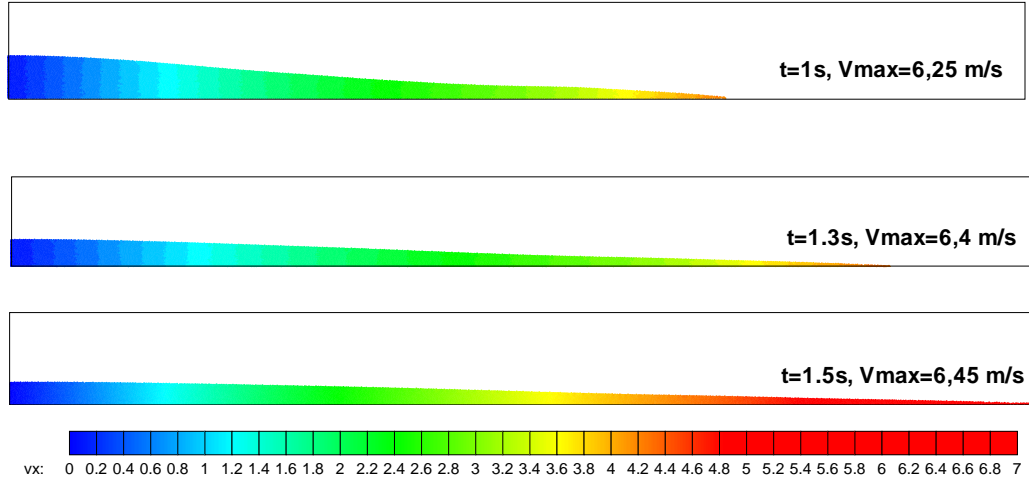


FIG. 9.3: Solution de Ritter obtenue avec SPH bifluide

9.3 Ecoulements d'échange avec SPH bifluide

Les simulations ont été réalisées en ne considérant que la dissipation physique avec le terme $\langle \Delta \vec{v} \rangle^{PSE}$. Les valeurs de ν utilisées sont celles citées dans le tableau 1 présenté dans la communication au Congrès Français de Mécanique [20], section [8.3].

L'équation de diffusion des espèces est également modélisée en utilisant le terme $\langle \Delta \phi \rangle^{PSE}$. La diffusion d'espèce est considérée avec $Sc = 1$. Toutefois, les discrétisations choisies, de l'ordre de 60 points en hauteur selon les cas ne permettent pas de conclure sur le traitement de la diffusion physique aux échelles associées.

Le calcul est mené avec un schéma décentré et permet d'obtenir une solution qui s'apparente encore à celle d'une modélisation par les équations d'Euler.

9.3.1 Résultats

Cas $\gamma = 0.9$ / $\rho^* = 0.228$

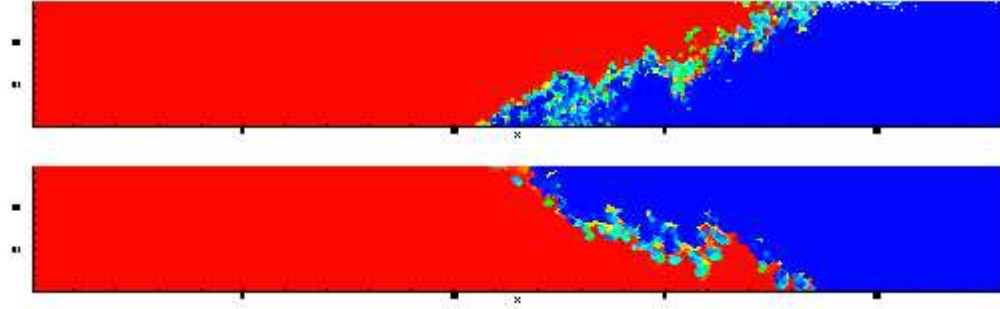


FIG. 9.4: Cas $\gamma = 0.9$ DGI et LGI $t=1s$, $Fr_d = 0.33$ et $Fr_l = 0.256$.

Cas $\gamma = 0.72$ / $\rho^* = 0.4$

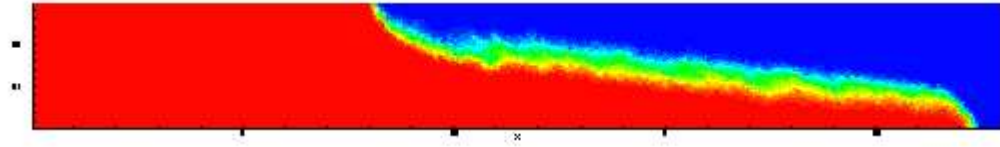


FIG. 9.5: Cas $\gamma = 0.72$ LGI $t=2s$, $Fr_d = 0.31$ et $Fr_l = 0.279$.

Cas $\gamma = 0.46$ / $\rho^* = 0.61$

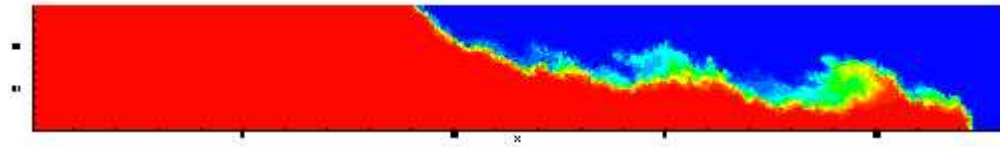


FIG. 9.6: Cas $\gamma = 0.46$ DGI et LGI $t=1s$, $Fr_d = 0.6$ et $Fr_l = 0.49$.

Cas $\gamma = 0.33$ / $\rho^* = 0.71$

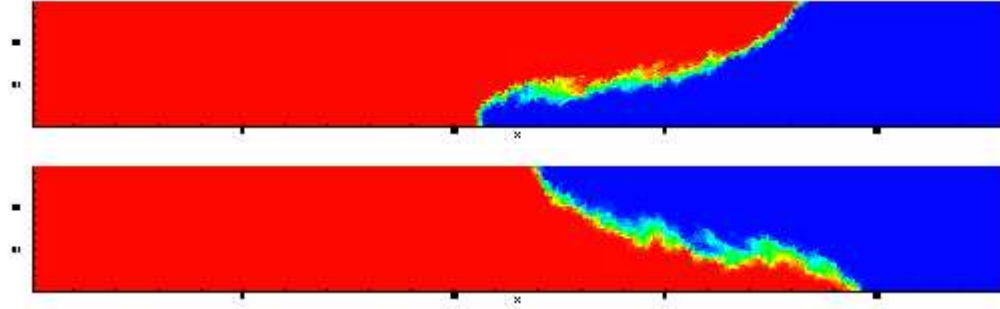


FIG. 9.7: Cas $\gamma = 0.33$ DGI et LGI $t=0.5s$, $Fr_d = 0.91$ et $Fr_l = 0.495$

9.3.2 Conclusion pour l'approche SPH bifluide

A l'issue de ces deux séries de calculs, SPH monofluide et bifluide, on peut remarquer qu'en changeant de modèle physique, la simulation des écoulements d'échange donnent des résultats plus stables dans le temps.

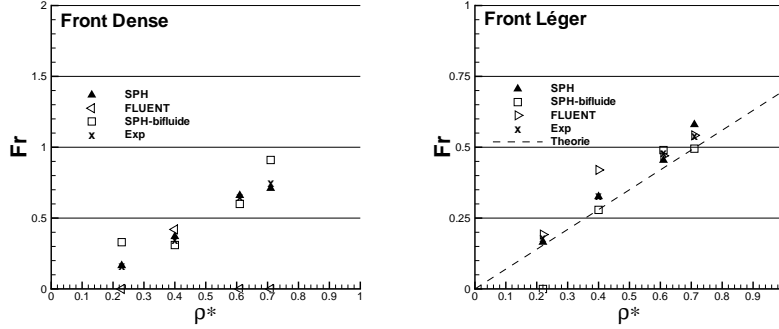


FIG. 9.8: Nombre de Froude obtenus par l'expérience, par SPH monofluide et bifluide, et par FLUENT

Les nombres de Froude proposés par les simulations restent en rapport avec les valeurs de la littérature. La description de l'interface met en évidence des structures s'apparentant à celles devant être générées par l'instabilité de Kelvin-Helmoltz. On considère donc que le formalisme SPH-bifluide avec $Sc = 1$ propose une physique plus réaliste mais ne correspond pas à la diffusion d'espèce physique du phénomène décrit.

Néanmoins, les simulations obtenues proposent des résultats moins précis pour la description des instabilités et des fronts que les résultats de la littérature :

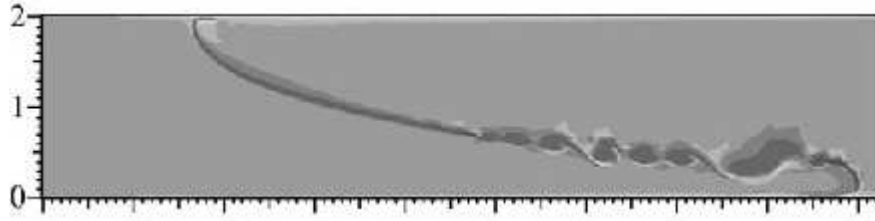


FIG. 9.9: Cas $\gamma = 0.05$ temps non communiqué. [27]

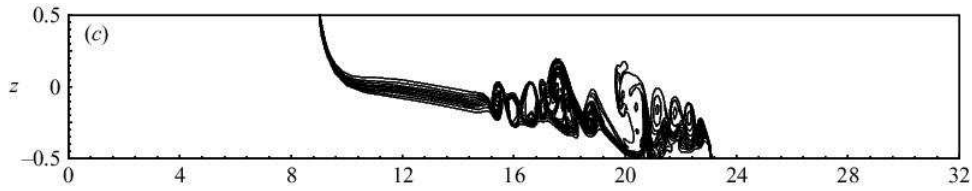


FIG. 9.10: Cas $\gamma = 0.2$ $t=10$ [8]

Deux points peuvent l'expliquer :

1. Les régimes étudiés expérimentalement ne sont pas encore modélisables physiquement. Ils le sont donc numériquement dans une limite donnée par la puissance des machines de calcul, puisque l'on est restreint à travailler sur une gamme limitée de régimes et contraints à faire de la DNS. Les cas envisagés devront être laminaires, dans une limite proche de la transition à la turbulence.
2. On constate que la méthode SPH sous la forme décrite dans la partie I ne permet pas de travailler de manière stable sur les régimes peu dissipatifs de la littérature. Seul l'augmentation de la dissipation physique permet de stabiliser le calcul. Mais de cette manière, on se détourne du résultat recherché. Dès lors, on va chercher à améliorer la robustesse du formalisme en trouvant un moyen de monter en ordre de résolution, et limiter ainsi la diffusion numérique de la méthode.

9.4 Modèles numériques pour le modèle bifluide

Le formalisme SPH jusqu'ici décrit s'apparente à une approche de type Lax-Wendroff des équations, puisque l'on utilise un schéma d'ordre 2 pour la partie hyperbolique des équations, associé à un terme de diffusion. Mais, utiliser les méthodes directes d'évaluation des flux, du type Lax Wendroff n'assure pas à la fois précision et robustesse.

Une autre solution est de résoudre séparément la partie hyperbolique des équations de manière exacte à l'aide d'un solveur de Riemann exact, en exploitant l'hyperbolicité partielle des équations.

Enrichi du modèle physique bifluide, il faut déterminer avec quel modèle numérique son utilisation prend un sens dans une simulation. A cet égard, l'étude se fait en confrontant les résultats proposés par le modèle bifluide (9.3) selon trois approches numériques :

1. Bifluide / SPH LaxWendroff (LW, code IFP)
2. Bifluide / SPH MUSCL (SPH-MUSCL, code INSAT/JPVila)
3. Bifluide / Volumes Finis (VF-MUSCL, code INSAT/JPVila)

L'usage du solveur de Riemann doit être suivi d'une résolution globale de l'équation de conservation avec un schéma numérique. C'est celui de Godunov au premier ordre et celui de VanLeer-MUSCL à un ordre supérieur à 1. L'intérêt de cette approche est de travailler de manière exacte sur les variables conservatives. Elles sont déterminées de manière semi-analytique, et servent ensuite au calcul des flux non conservatifs. Cette approche, qui scinde la résolution en deux étapes, produit une diffusion numérique totale beaucoup plus faible que dans une approche globale directe (LW) pour le calcul des flux.

Pour comparer ces deux approches, le code Eulérien bifluide Volumes Finis constitue une troisième approche qui va permettre de voir l'éventuelle influence de l'approche lagrangienne. C'est un outil de travail performant à l'exécution utilisant les mêmes paramètres et modèles physiques.

On décrit succinctement la résolution du système formé par les lois de conservation avec le schéma de VanLeer d'ordre élevé (MUSCL). Pour de plus amples explications, le lecteur est renvoyé à la littérature citée en bibliographie [2].

9.5 Approche bifluide SPH-MUSCL

On désigne par le vecteur $H = [\eta]$ de composantes η les variables conservatives du système (9.3). L'idée est de voir chaque équation de conservation projetée sur l'axe d'un repère adapté pour la résolution avec la variable "position" r , et sous une forme :

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial F(H)}{\partial r} = S(H) \quad (9.12)$$

où l'on a fait apparaître $F(H)$ le flux des variables conservatives.

Dans le cas présent, η désigne les variables $(\rho\phi u, \tilde{\rho}_1 u, \tilde{\rho}_2 u, \rho u^2 + p^*)$. Pour parvenir à obtenir la forme (9.12), on peut envisager (9.3) sous la forme :

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{F}(H)}{\partial x} + \frac{\partial \mathcal{G}(H)}{\partial y} = S_{Visqueux}(H) + S_{autres}(H) \quad (9.13)$$

\mathcal{F} et \mathcal{G} sont les flux des variables conservatives $H = [\eta]$ sur les deux directions de l'espace.

Grâce à l'invariance des équations d'Euler en rotation, les équations peuvent être projetées dans un repère adapté pour réduire le calcul à une équation repérée par l'abscisse r . Les forces de dissipation, de capillarité et de gravité seront considérées dans le terme source à l'issue d'une première étape de résolution.

Cette première étape sera la résolution d'un problème de Riemann associé à la partie hyperbolique de (9.13) projetée sur r , c'est-à-dire l'équation (9.12).

Pour une particule i de voisinage $D(i)$, le calcul requiert la résolution d'un problème de Riemann pour chaque élément de $D(i)$, ce qui autorise des résolutions de problèmes entre particules n'étant pas en contact. Le problème de Riemann unidimensionnel, entre une particule i et un de ses voisins j est :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial H_i}{\partial t} + \left[\frac{\partial F(H)}{\partial r} \right]_i = 0, \\ \text{où } H_i = (\rho\phi, \tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2, \rho u)_i \text{ et } F(H)_i = (\rho\phi u, \tilde{\rho}_1 u, \tilde{\rho}_2 u, \rho u^2 + p^*)_i \\ \text{avec la condition initiale : } H_0(r_i, v_{0i}) = \begin{cases} H_{0i}, & \text{si } r_{0i} < 0 \\ H_{0j}, & \text{si } r_{0i} > 0 \end{cases} \end{array} \right. \quad (9.14)$$

La solution de (9.14) est le champ de solution $H_E(r/t, \eta_i, \eta_j)$ interprétable dans un diagramme de caractéristiques (r, t) . Parmi ce champ de solution on s'intéresse $H_E(u_{0i}, \eta_i, \eta_j)$, qui correspond à l'état porté par l'onde caractéristique de vitesse u_{0i} .

9.5.1 Similitude avec une approche Volumes Finis du formalisme SPH

Pour une particule SPH i , et un volume de contrôle K , on étudie deux écritures discrètes de la loi de conservation hyperbolique pour la variable locale η . Les deux quantités i et K peuvent être considérées équivalentes d'un point de vue de modélisateur. On va ainsi montrer la similitude existant entre l'expression de la loi de conservation avec le formalisme SPH-solveur de Riemann et un schéma Volumes Finis.

Le schéma SPH propose pour i de volume ω_i , on l'a vu en section [2.2.7] :

$$\frac{d}{dt}(\omega_i \eta_i) + \omega_i \sum_{j \in D(i)} \omega_j (\vec{F}_j + \vec{F}_i) \cdot \vec{A}_{ij} = 0 \quad (9.15)$$

Une approche volume finis propose sur la maille K de volume V_K un flux G agissant sur les bords de la maille :

$$\frac{d}{dt}(V_K \eta_K) - \int_{\partial K} (\vec{G} \cdot \vec{n}) ds = 0 \quad (9.16)$$

En deux dimensions, cette maille est un polygone de côté de longueur l_K . L'équation (9.17) se discrétise selon :

$$\frac{d}{dt}(V_K \eta_K) - \sum_{l_K} l_K (\vec{G}_l \cdot \vec{n}) = 0 \quad (9.17)$$

On va montrer que SPH peut s'écrire sous une forme :

$$\frac{d}{dt}(\omega_i \eta_i) + \sum_{j \in D(i)} l_{ij} (\vec{G}_{SPH} \cdot \vec{n})_{ij} = 0 \quad (9.18)$$

Si on pose :

$$\vec{A}_{ij} = \|A_{ij}\| \vec{n}_{ij} \quad (9.19)$$

L'évolution de $\omega_i \eta_i$ au point \vec{r}_i se fait donc en sommant les interactions sur les voisins j situés en \vec{r}_j , qui agissent suivant la direction \vec{n}_{ij} .

$$\vec{n}_{ij} = \frac{\vec{r}_{ij}}{\|\vec{r}_{ij}\|} \quad (9.20)$$

Ainsi :

$$\frac{d}{dt}(\omega_i \eta_i) + \sum_{j \in D(i)} (\omega_i \omega_j) (\vec{F}_j + \vec{F}_i) \|A_{ij}\| \cdot \vec{n}_{ij} = 0 \quad (9.21)$$

A partir de cette forme, il est possible de retrouver une forme semblable à (9.18). Il est donc possible d'obtenir une forme discrète pour l'équation (9.12), celle-ci à la forme :

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [F(r_{ij}, t, \eta) \cdot \vec{n}_{ij}] = 0 \quad (9.22)$$

On peut maintenant déterminer quelle forme discrète convient pour évaluer $F(r_{ij}, t, \eta)$.

9.5.2 Solveur de Riemann exact

Soit un champ de transport régulier $v^0(x, t)$. On considère la forme conservative des équations d'Euler 2D :

$$L_{v^0}(H) + \sum_{l=1,d} \frac{\partial}{\partial x^l} (F_E^l(H) - v^{0,l} H) = 0, \quad (9.23)$$

où les flux F_E^l sont donnés par :

$$(i) \quad F_E^1(H) = \begin{pmatrix} \rho v^1 \\ p + \rho(v^1)^2 \\ \rho v^1 v^2 \\ v^1(p + E) \end{pmatrix}, \quad (ii) \quad F_E^2(H) = \begin{pmatrix} \rho v^2 \\ \rho v^1 v^2 \\ p + \rho(v^2)^2 \\ v^2(p + E) \end{pmatrix}. \quad (9.24)$$

Entre i et j , on doit résoudre le problème :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(H) + \frac{\partial}{\partial x} [F_E(H) \cdot n_{ij} - v^0(x_{ij}, t) \cdot n_{ij} H] = 0, \\ H(x, 0) = \begin{cases} H_i & \text{if } x < 0, \\ H_j & \text{if } x > 0 \end{cases}, \end{cases} \quad (9.25)$$

Dans le cas classique des équations d'Euler :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(H) + \frac{\partial}{\partial x} (F_E(H) \cdot n_{ij}) = 0, \\ H(x, 0) = \begin{cases} H_i & \text{if } x < 0, \\ H_j & \text{if } x > 0 \end{cases}, \end{cases} \quad (9.26)$$

Soit $H_E(x/t; H_i, H_j)$ la solution de ce problème. Un calcul simple montre que la solution de (9.25) est donnée par :

$$\begin{cases} H = H_E\left(\frac{x + X^0(t)}{t}; H_i, H_j\right), \\ X^0(t) = \int_0^t v^0(x_{ij}, \tau) \cdot n_{ij} d\tau. \end{cases} \quad (9.27)$$

En conséquence, un choix raisonnable pour le flux est $g_E(n_{ij}, \eta_i, \eta_j)$ du schéma de Godunov associé à l'approximation SPH est :

$$\begin{cases} \lambda_{ij}^0 = v^0(x_{ij}, t) \cdot n_{ij}, \\ H_{ij}(\lambda_{ij}^0) = H_E(\lambda_{ij}^0; H_i, H_j), \\ G_E(H_i, H_j) = F_E(H_{ij}(\lambda_{ij}^0)) - v^0(x_{ij}, t) \otimes H_{ij}(\lambda_{ij}^0), \\ g_E(n_{ij}, H_i, H_j) = G_E(H_i, H_j) \cdot n_{ij}. \end{cases}$$

La forme résultante pour l'approximation est :

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}(x_i) = v^0(x_i, t), \\ \frac{d}{dt}(w_i) = w_i \operatorname{div}(v^0(x_i, t)), \\ \frac{d}{dt}(w_i H_i) + w_i \sum_{j \in P} w_j 2G_E(H_i, H_j) \vec{\nabla}_i W_{ij} = 0, \\ H_i(0) = \Phi^0(\xi_i) \end{cases}$$

Les équations pour la masse, la quantité de mouvement et la conservation de l'énergie sont :

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}(w_i \rho_i) + w_i \sum_{j \in P} w_j 2\rho_{E,ij}^0 (v_{E,ij}^0 - v^0(x_{ij}, t)) \cdot \vec{\nabla} W_{ij} = 0, \\ \frac{d}{dt}(w_i \rho_i v_i) + w_i \sum_{j \in P} w_j 2 [\rho_{E,ij}^0 v_{E,ij}^0 \otimes (v_{E,ij}^0 - v^0(x_{ij}, t)) + p_{E,ij}^0] \cdot \vec{\nabla} W_{ij} = 0, \\ \frac{d}{dt}(w_i \rho_i E_i) + w_i \sum_{j \in P} w_j 2 [E_{E,ij}^0 (v_{E,ij}^0 - v^0(x_{ij}, t)) + p_{E,ij}^0 v_{E,ij}^0] \cdot \vec{\nabla} W_{ij} = 0, \end{cases}$$

where $(\rho_{E,ij}^0, \rho_{E,ij}^0 v_{E,ij}^0, E_{E,ij}^0)^T = \Phi_{ij}(\lambda_{ij}^0)$.

9.5.3 Flux d'ordre supérieur : VanLeer-MUSCL

Le flux de Godunov est la possibilité la plus simple, qui consiste à évaluer le flux à l'aide de fonctions constantes par morceaux. Il remplace l'approximation centrée du flux $(F(\eta_i) + F(\eta_j)) \cdot \vec{n}_{ij}$ par un flux $2g(n_{ij}, \eta_i, \eta_j)$ du premier ordre.

Naturellement, l'erreur de précision associée à g constitue la diffusion numérique du schéma. Celle-ci peut s'interpréter comme le terme Π_{ij} vu précédemment. Cette erreur est liée à la précision de l'information donnée sur (n_{ij}, η_i, η_j) . Pour monter en ordre sur l'équation (9.21), le raisonnement de VanLeer vise à monter en ordre sur l'évaluation de η_i et η_j .

On peut améliorer la modélisation du flux g en utilisant une discrétisation linéaire discontinue, et non plus constante par maille :

$$F(r_{ij}, t, \eta) \cdot \vec{n}_{ij} = g(n_{ij}, \eta_{ij}, \eta_{ji}) \quad (9.28)$$

avec

$$\eta_{ij} = \eta_i + (\nabla \eta)_i (r_{ij} - r_i) \quad (9.29)$$

Des instabilités peuvent être gérés par ce processus. Pour y remédier, le modèle MUSCL utilise un limiteur de pente. C'est-à-dire qu'il majore l'incrément constitué par $(\nabla \eta)_i$, en imposant que la nouvelle variable η_{ij} satisfasse :

$$\eta_{ij} - \eta_i = \lambda_{ij}(\eta_j - \eta_i) \quad \text{avec } 0 < \lambda_{ij} < 1 \quad (9.30)$$

9.5.4 Mise en oeuvre pratique

Les étapes sont donc :

1. Résolution du système hyperbolique rapporté de (9.13) avec un solveur de Riemann exact. Cette première étape doit être implémentée de façon judicieuse pour déduire directement l'état de i des résultats connus au niveau continu.
2. Calcul pour (9.13) des flux avec un schéma du second ordre en espace, MUSCL, et des termes sources, avec les solutions données par la première étape.
3. Résolution en temps du système complet obtenu (9.13) avec un schéma du second ordre (RK2 en temps)

9.6 Validation du modèle bifluide dans le cas de Boussinesq

Notre volonté de chercher à maîtriser à la fois le modèle numérique et le modèle physique nous impose de nous restreindre à des régimes potentiellement atteignables.

Pour réduire le nombre de points nécessité par les critères vu en (8.6), on choisit de diminuer le nombre de Reynolds de l'écoulement. Pour rester dans le même temps lié à des cas physiquement étudiés et référencés, il faut considérer aussi un rapport de densité γ proche de 1. C'est pourquoi la validation est réalisée dans le régime de Boussinesq.

Les fluides pris en considération sont toujours sous un rapport $\gamma = 1.027$, soit $\rho^{*2} = 0.0526$. Le nombre de Reynolds de la simulation est augmenté en changeant la viscosité dynamique des fluides. Leur coefficient de diffusion de matière est réglé de manière à être dans le cas $Sc = 0.71$ [36].

Pour rester en adéquation avec les usages de la littérature, on continue de désigner chaque cas par le nombre de Grashof Gr , défini par (7.1), avec $v_0^2 = \rho^{*2} gh_f$:

$$Gr = \frac{g(\rho^*)^2 h_f^3}{\nu^2} \quad (9.31)$$

Les résultats qui suivent montrent la fraction volumique ϕ , qui vaut 0 ou 1 initialement dans les deux parties du domaine, puis change de valeur mais aussi de distribution à l'interface.

Le domaine considéré à une longueur $L = 12$ et une hauteur $H = 2$. La discrétisation a été de 100 points en hauteur pour les calculs réalisés avec MUSCL et 200 points pour ceux réalisés avec l'approche de type Lax-Wendroff. En nombre total de points, cela équivaut à 60000 points avec MUSCL (VF ou SPH), quand SPH bifluide LW utilise 240000 points. La raison pour laquelle on a considéré plus de points en approche type LW est que

l'on a cherché à valider des solutions préalablement obtenues avec 60000 points. La convergence de la résolution n'a pas pu être obtenue avec 100 points en hauteur. La validation s'est faite par rapport à l'approche MUSCL, qui est apparue elle, avec un raisonnement similaire, convergée avec 100 points sur la hauteur. La référence commune aux deux approches lagrangiennes sera le code Volume Finis Eulerien bifluide.

Pour réaliser les calculs, on a utilisé en calcul séquentiel les noeuds du supercalculateur-linux-IFP. Chaque noeud propose une puissance de calcul supérieure au processeur du PC personnel de l'ordre de $3Ghz$.

9.6.1 Gr=2300

Ce cas est assez dissipatif puisqu'il équivaut à $Re = 48$. Il doit nous servir à évaluer le comportement du modèle dans un régime où il est facile de mesurer le développement des couches de diffusion. Le coefficient de diffusion des espèces $\kappa = 0.021m^2.s^{-1}$ suppose une couche de diffusion en $\sqrt{\kappa\tau}$, c'est à dire pour un calcul de $4s$, une couche limite de $0.28m$. Avec 100 points ($\|\vec{r}_0\| = 0.02$) on peut penser raisonnablement décrire les couches de diffusion existant à la date considérée sur les figures.

SPH bifluide LW / VF bifluide MUSCL

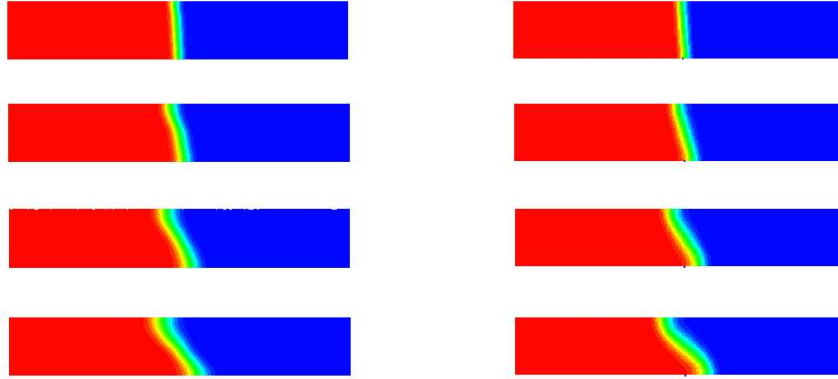


FIG. 9.11: Comparaison des approches SPH bifluide LW et VF sur les temps $\tau = 1, 2, 3, 4s$

Le front ne se déplace pas beaucoup sur les temps affichés car le régime est très dissipatif. Comparés à la méthode eulérienne VF, SPH-bifluide LW produit une simulation correcte du phénomène sur les temps considérés, mais doit utiliser beaucoup plus de points (200 en hauteur) en utilisant $R = 1.2$ pour avoir des résultats comparables à la modélisation VF-MUSCL.

L'épaisseur des couches limites n'est pas rigoureusement celle donnée par le critère cité car le phénomène n'est pas purement diffusif, le transport intervient dans le phénomène, et la transition continue en valeur de la fraction volumique ne permet pas de distinguer nettement toute la couche. C'est le seul cas pour lequel on ait les résultats de SPH-bifluide LW en accord avec les résultats proposés par les modèles bifluides MUSCL.

VF bifluide MUSCL / SPH bifluide MUSCL

Sur le même cas d'étude, on compare les résultats donnés par la méthode VF bifluide MUSCL à SPH bifluide MUSCL.

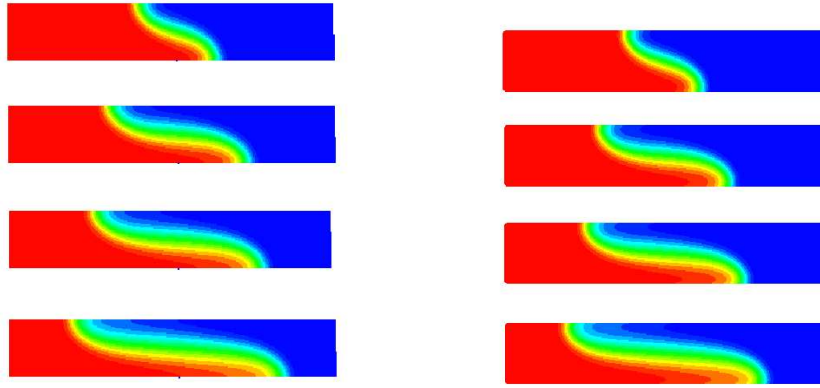


FIG. 9.12: Comparaison pour les temps $\tau = 6, 10, 12, 15s$

On constate donc qu'avec quatre fois moins de points et une valeur de $R = 0.9$, quand l'approche LW a été réalisée avec $R = 1.2$, l'approche MUSCL permet d'obtenir facilement des résultats sur des temps plus longs.

9.6.2 Gr=230000

Pour monter en nombre de Reynolds équivalent, on se place à un régime qui équivaut à $Re = 480$. Pour SPH-bifluide LW, parmi tous les régimes testés, ce cas est celui pour lequel le nombre de Reynolds associé est le plus grand.

Le coefficient de diffusion des espèces $\kappa = 0.0021 m^2.s^{-1}$ suppose une couche de diffusion en $\sqrt{\kappa\tau}$, c'est à dire pour un calcul de $4s$, une couche limite de $0.1m$. Avec 100 points ($\|\vec{r}_0\| = 0.02$) on peut penser raisonnablement décrire les couches de diffusion existant à la date considérée sur les figures, au moins avec le modèle MUSCL.

SPH bifluide LW / VF bifluide MUSCL

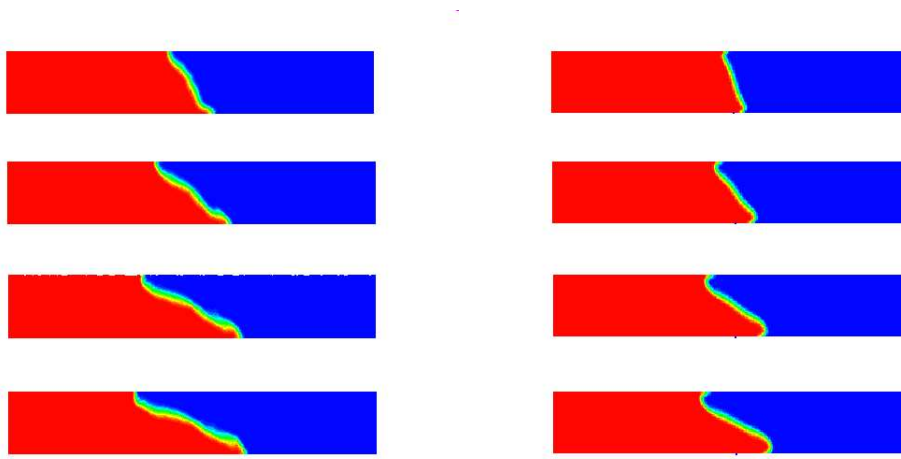


FIG. 9.13: Comparaison pour les temps $\tau = 4, 6, 8, 9s$

Une première résolution a été menée avec 60000 points, mais elle n'était pas concluante. Avec 240000 points, le calcul a été important en temps calcul, une semaine pour atteindre le temps final considéré. On attend de cette résolution fine un moyen de conclure sur si la méthode SPH-bifluide-LW en obtenant un cas de référence convergé pour ce régime. Pourtant, les résultats obtenus ne s'avèrent pas satisfaisants. En effet, l'interface ne développe pas de couche limite sur ϕ de la même manière avec SPH bifluide LW et les méthodes bifluide MUSCL.

Pour l'expliquer, deux raisons peuvent être proposées :

- La première serait la résolution spatiale, qui est encore trop grossière pour traiter la diffusion de la quantité de mouvement. La taille d'une particule équivaut à $\|\vec{r}_0\| = 0.01$, ce qui correspond, d'après le critère d'Härtel, à $Re \sim 400$. La discrétisation est donc un peu trop grossière malgré le coût du calcul important.
- La seconde serait l'ordre de la résolution qui ne parvient pas à produire un calcul assez précis compte-tenu de la diffusion numérique intrinsèque. Cette idée semble confirmée par les résultats généraux obtenus avec l'approche MUSCL. Dans la suite, les cas considérés ne seront donc plus réalisés avec SPH bifluide LW.

VF bifluide MUSCL / SPH bifluide MUSCL

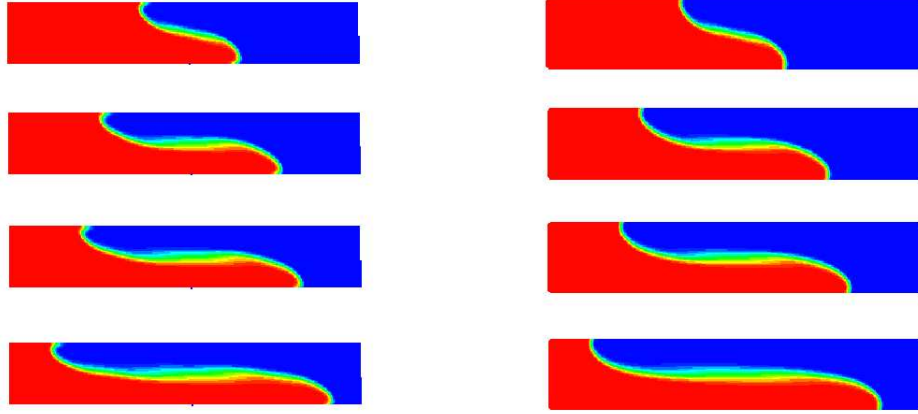
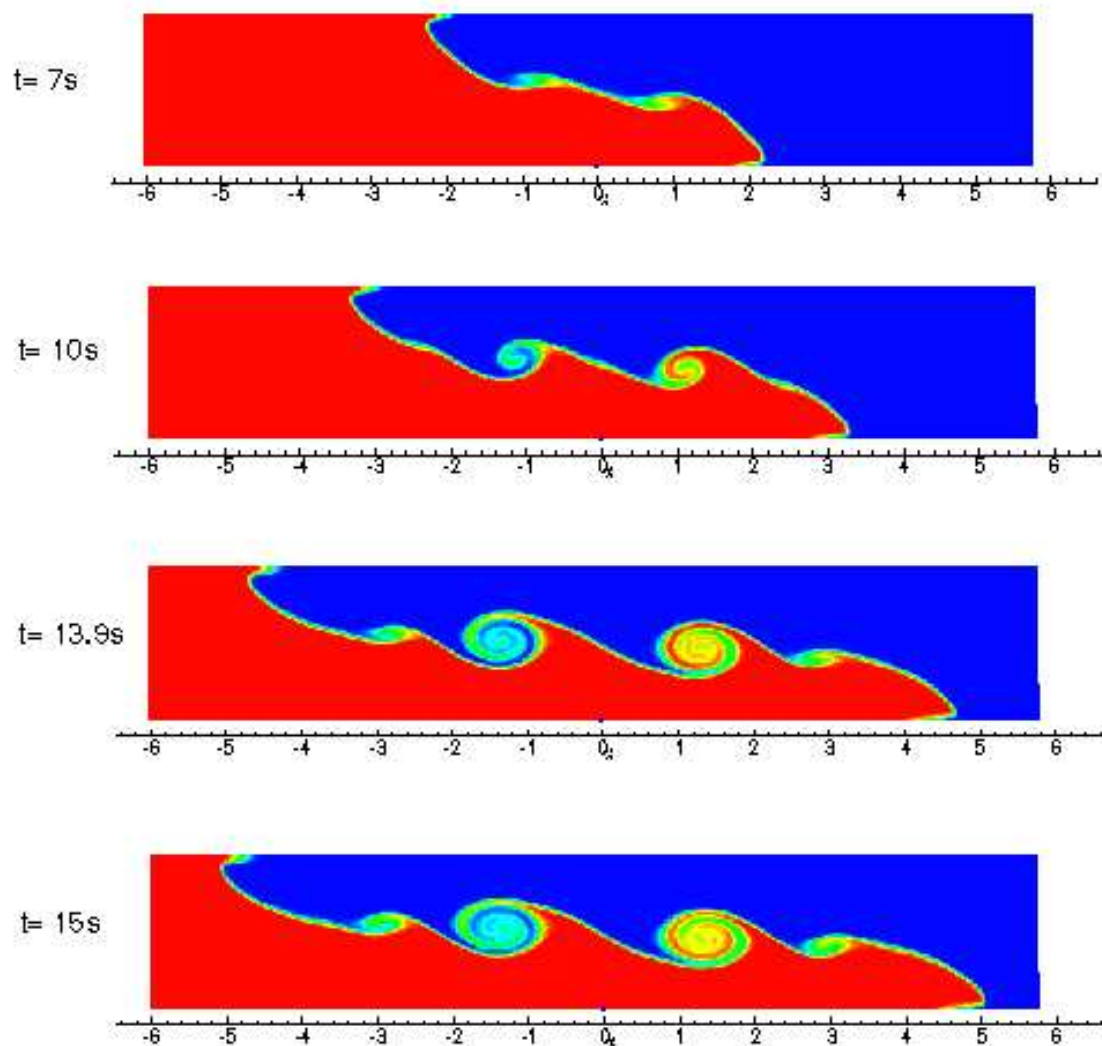


FIG. 9.14: Comparaison pour les temps $\tau = 6, 10, 12, 15s$

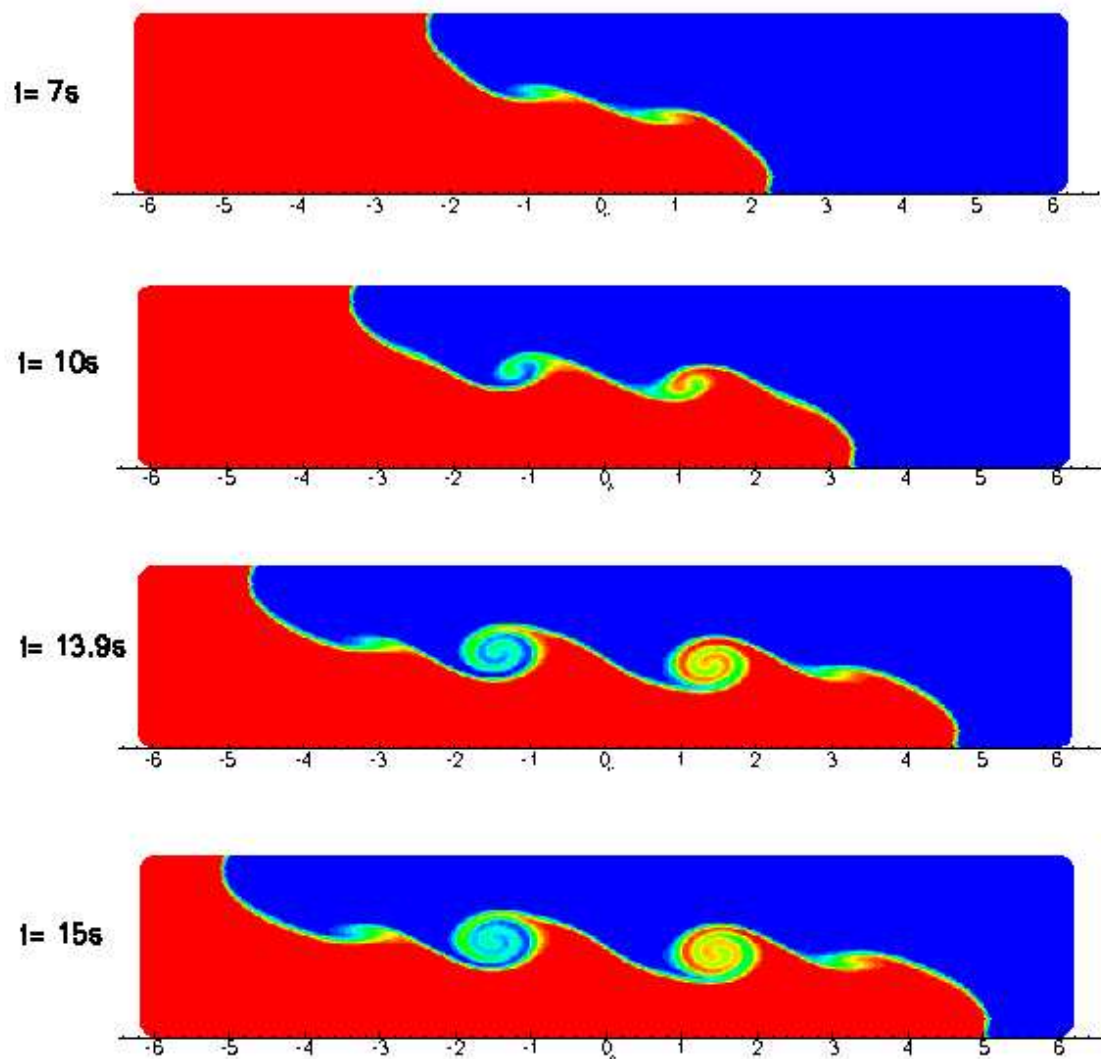
9.6.3 $Gr = 2.28 \cdot 10^7$

Ce régime, qui équivaut à $Re = 4775$, va permettre de considérer des instabilités de Kelvin-Helmoltz dont l'échelle est de l'ordre des dimensions du compartiment. Le coefficient de diffusion des espèces est $\kappa = 2.1 \cdot 10^{-4} m^2.s^{-1}$ supposant une couche de diffusion en $\sqrt{\kappa\tau}$, c'est à dire pour un calcul de $15s$, une couche limite de $0.047m$. Avec 100 points ($\|\vec{r}_0\| = 0.02$) on peut penser raisonnablement décrire les couches de diffusion existant à la date considérée sur les figures, au moins avec le modèle MUSCL.

VF bifluide MUSCL

FIG. 9.15: Approche VF pour temps $\tau = 6, 10, 12$ et $15s$.

SPH bifluide MUSCL

FIG. 9.16: Approche Godunov temps $\tau = 6, 10, 12$ et $15s$.

La simulation montre une génération symétrique de deux paires de rouleaux dans chaque direction, comme les publications citées en [7.1.1]. Sur les temps adimensionnels $\hat{t} = 5, 10$ équivalents aux temps physiques $t = 7s, 13.9s$, l'interface a une disposition similaire à celle obtenue avec la méthode spectrale.

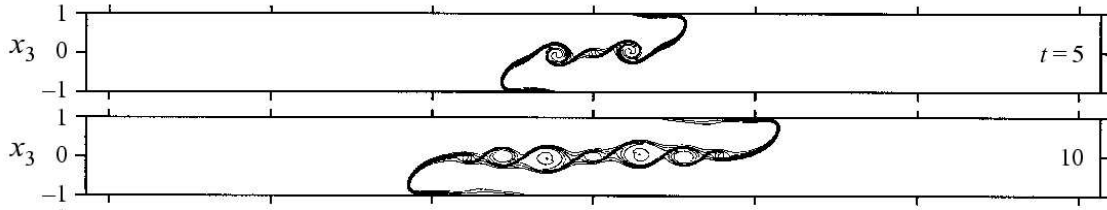


FIG. 9.17: Approche spectrale pour temps adimensionnel $\hat{t} = 5, 10$.

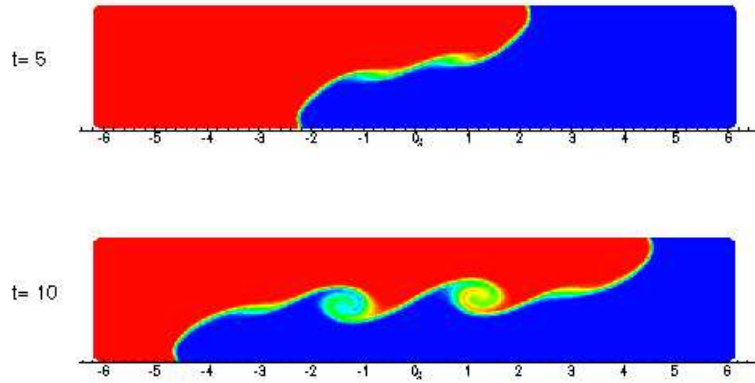


FIG. 9.18: Approche SPH bifluide MUSCL pour temps adimensionnel $\hat{t} = 5, 10$.

9.6.4 Conclusion

Dans le régime d'un écoulement à bas nombre de Reynolds jusqu'à celui approchant la transition à la turbulence. L'approche considérée montre que la méthode SPH est capable de rendre compte du phénomène physique, retrouver les structures symétriques à l'interface, si on lui associe un schéma d'ordre de précision élevé, la méthode SPH bifluide MUSCL.

Néanmoins, une modélisation de phénomène à des nombres de Grashof supérieurs semble requérir, dans la limite des capacités des codes à disposition et de la puissance des calculateurs, une modélisation de la turbulence.

9.7 Ecoulement d'échange avec SPH MUSCL bifluide

Grâce aux formalisme obtenu, on reprend les cas étudiés et on obtient des résultats proposant un développement d'instabilités proches des résultats académiques. Chaque écoulement est simulé avec 110000 particules, c'est-à-dire 120 en hauteur, ce qui est équivalent à un pas d'espace de 0.0025. Les coefficients de diffusion sont réglés comme suit :

$$\kappa = \nu = 1.5.10^{-5} m^2.s^{-1}$$

car

$$\kappa = \frac{\nu}{Sc} \text{ avec } Sc = 1$$

Ainsi, pour un calcul de 1s, il faut s'attendre à une couche limite de $\sqrt{\kappa T} = 0.004$, donc la discrétisation est trop grossière pour espérer résoudre toutes les échelles.

Pour des raisons de temps calcul, un choix a été réalisé parmi les cas à reprendre, et seul trois régimes ont été simulés. Les nombres de Froude associés sont en accord avec les résultats vu précédemment.

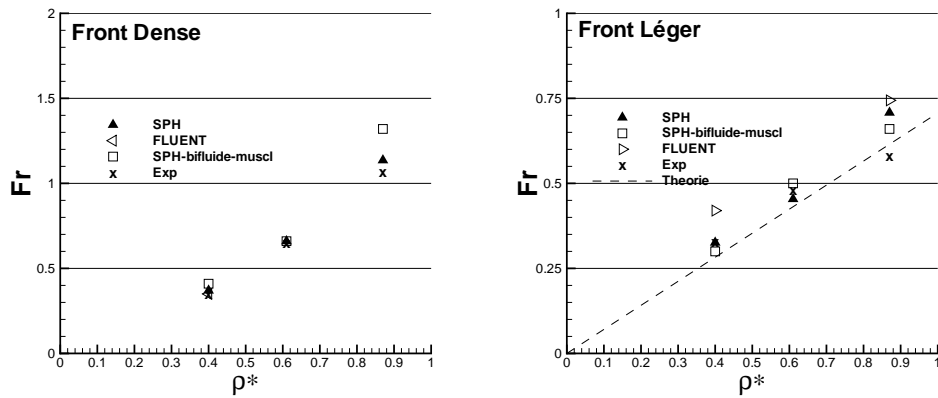
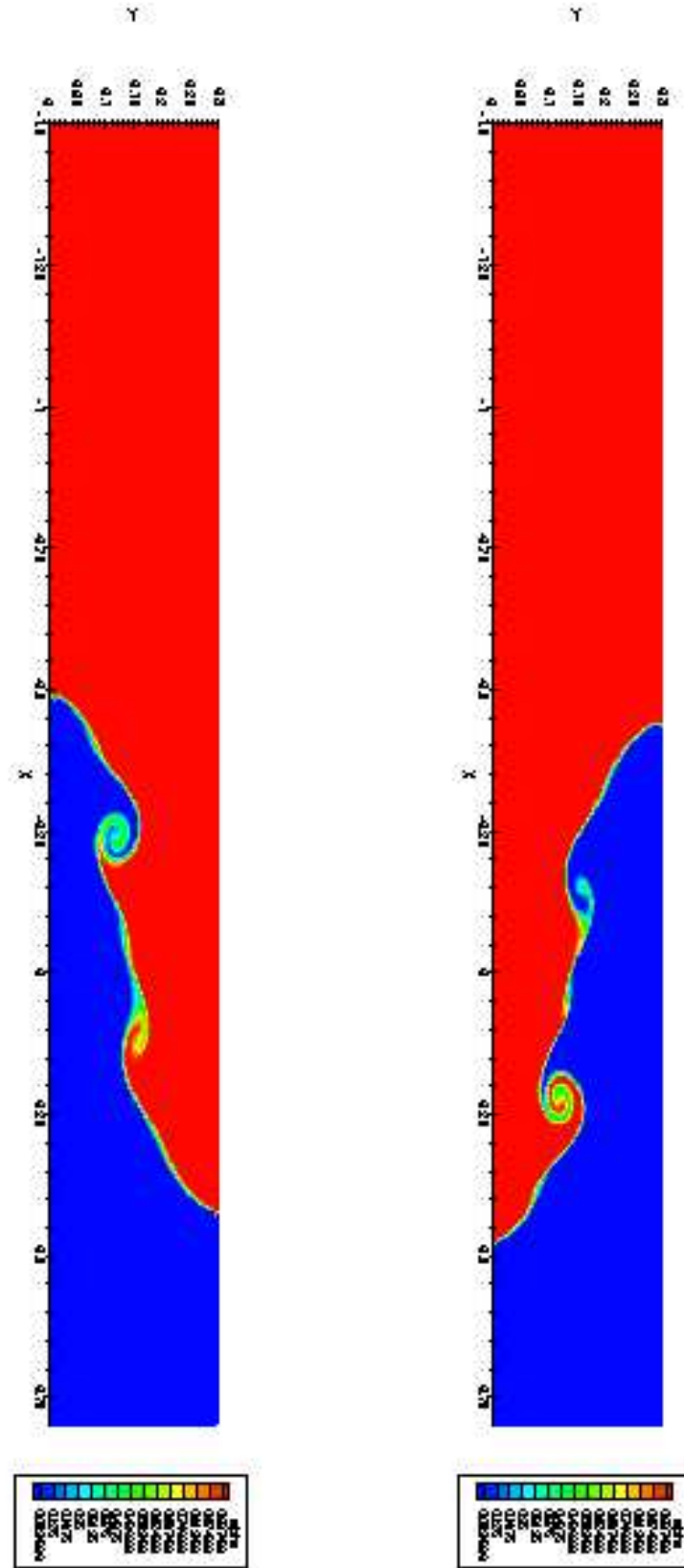


FIG. 9.19: Nombre de Froude obtenus par l'expérience, par une méthode SPH classique et par SPH bifluide MUSCL.

Dans tous les cas, on retrouve bien la génération d'instabilités asymétriques, mais pas d'interface horizontale loin derrière le front. Des similitudes franches avec les figures présentées en (9.3.2) sont pas clairement établies, surtout pour le nombre d'instabilités développées. Mais la méthode SPH-MUSCL semble avoir montré des capacités à traiter ce type de phénomène. Cependant, la simulation de ce type de phénomène sans modélisation de la turbulence semble peu probable à réaliser.

FIG. 9.20: Cas $\gamma = 0.72 / \rho^* = 0.4$ DGI $t=1s$ et LGI $t=1s$, $Fr_d = 0.41$ $Fr_l = 0.3$

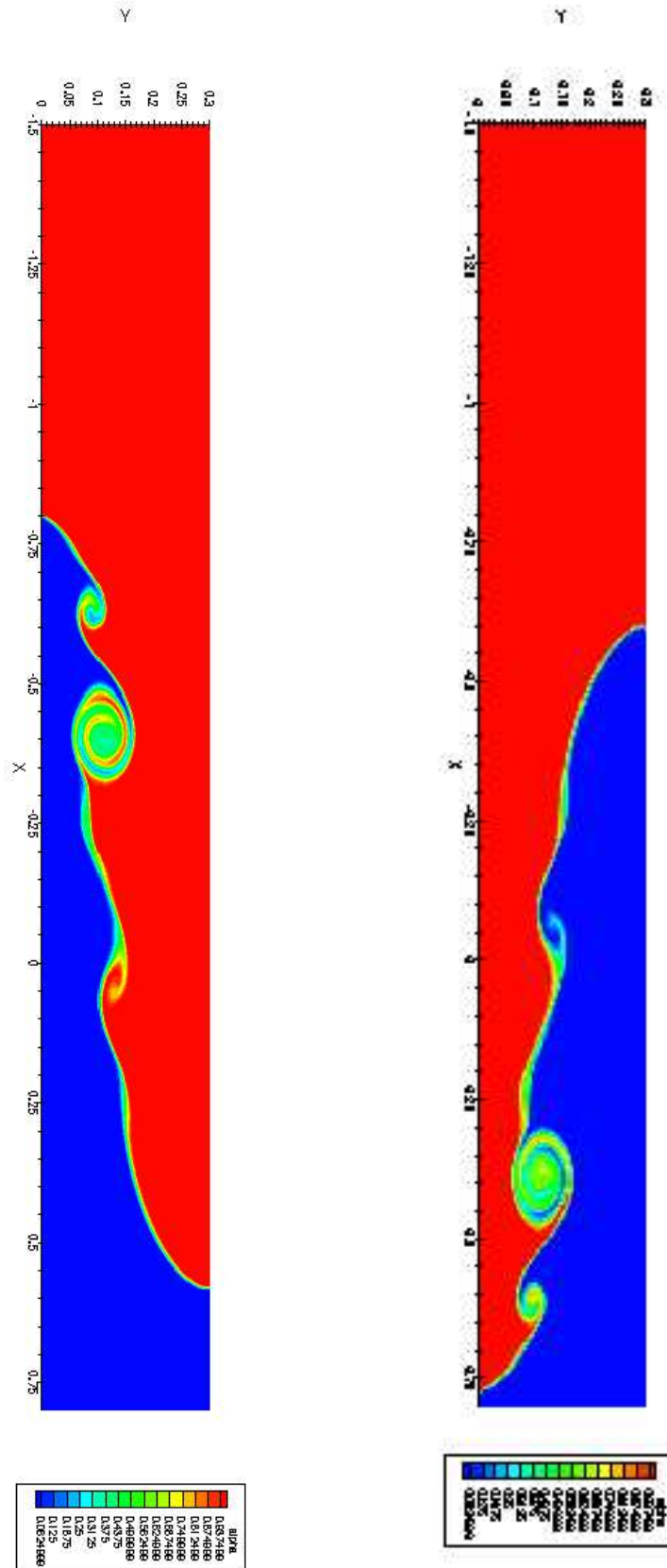
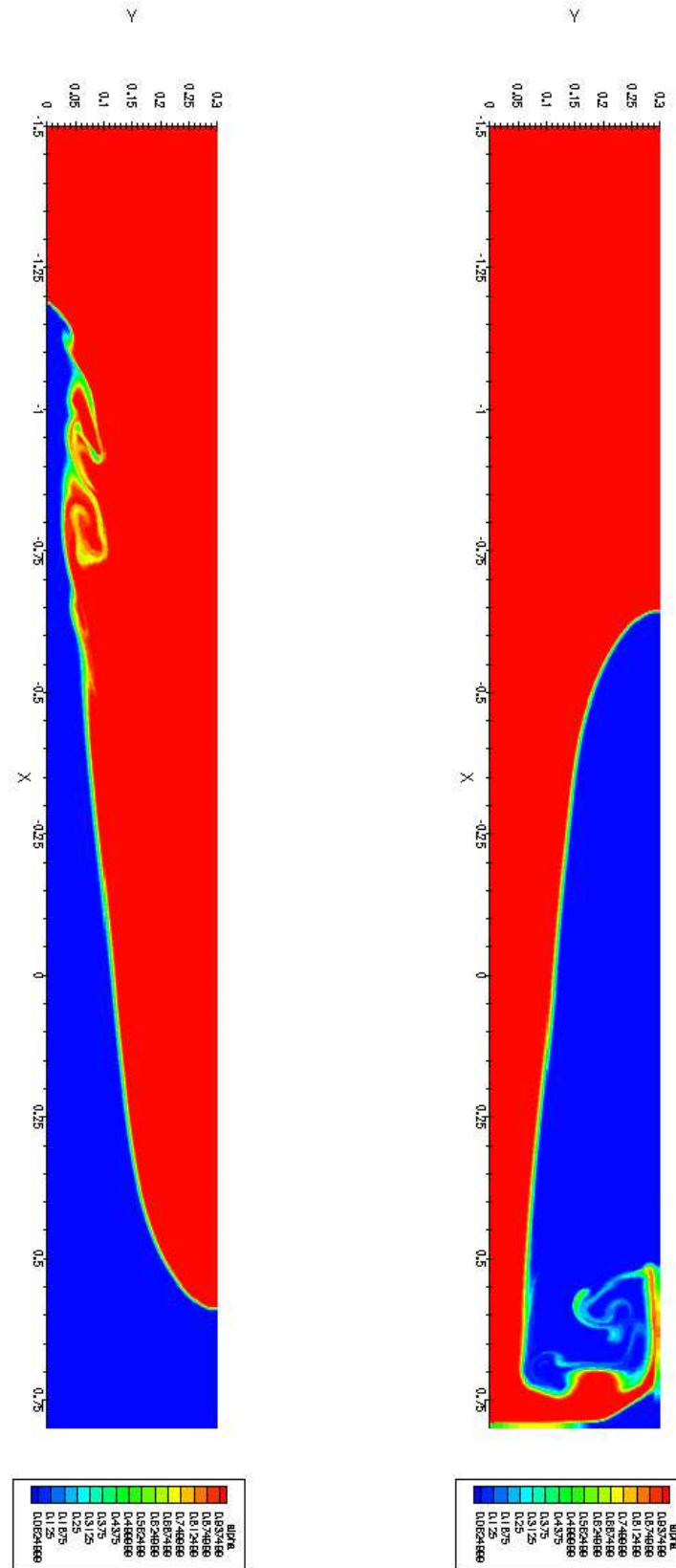


FIG. 9.21: Cas $\gamma = 0.46 / \rho^* = 0.61$ DGI $t=1s$ et LGI $t=1s$, $Fr_d = 0.66$ $Fr_l = 0.5$

FIG. 9.22: Cas $\gamma = 0.138$ / $\rho^* = 0.87$ DGI $t=0.75s$ et LGI $t=0.75s$ $Fr_d = 1.32$ $Fr_l = 0.66$

Conclusion de la thèse

Depuis que Smoothed Particle Hydrodynamics est devenue une méthode numérique admise et convenue pour modéliser la Mécanique des Milieux Continus, il est avéré que son formalisme est très efficace lorsqu'il est appliqué, par exemple, à l'Hydrodynamique. L'explication tient au fait que le transport d'une discontinuité dans le domaine est réalisé sans équation spécifique, et donc sans qu'une erreur numérique y soit associée.

La faiblesse de la méthode réside dans sa sensibilité aux instabilités numériques. Malgré les premières améliorations apportées par l'ajout d'une viscosité de VonNeumann, puis du lissage conservatif des valeurs, la méthode classique ne propose pas clairement de schéma générique, à la fois stable et d'ordre élevé.

Pour travailler avec un modèle numérique qui vérifie au mieux ces deux conditions, on s'est appuyé sur des progrès récents. Ainsi, la renormalisation des formules de quadrature pour l'approximation de l'opérateur gradient apporte à la méthode les moyens de gagner en robustesse et en nombre d'opérations. Pour se maintenir à un niveau de performance comparable avec l'opérateur laplacien, un nouveau schéma particulière a été proposé, c'est le schéma PSE renormalisé. La stabilité s'obtient par l'utilisation d'un lissage des valeurs appropriées, telles la pression, et de la diffusion physique aux échelles adéquates.

Dans l'étude, on a cherché à élargir le champ d'application de la méthode en mécanique des fluides, pour observer son potentiel et améliorer le formalisme. Les exemples considérés sont en rapport avec l'industrie pétrolière et décrivent des cas couramment rencontrés.

En premier lieu, on considère un écoulement visqueux lors de la production dans une conduite. Le calcul $2D$ est soumis à des conditions de stabilité restrictives sur le pas de temps. Il est donc apparu nécessaire de mener des développements similaires à ceux qui auraient été réalisés avec une méthode eulérienne. Mise en oeuvre à l'IFP, une approche implicite de la diffusion visqueuse a pu améliorer, dans certains cas, le temps calcul d'un facteur 100 par rapport à celui utilisé par les approches explicites. Deux schémas furent considérés, celui utilisant deux approximations particulières successives du gradient, et le terme PSE renormalisé. C'est ce terme qui engendre le moins d'opérations et est donc le plus rapide en temps-calcul.

En second lieu, c'est par l'étude des écoulements gravitaires que les performances de la méthode ont été observées et qu'une nouvelle amélioration du formalisme a été établie. Le cas d'étude considéré est celui des écoulements d'échange. Il constitue un exemple où les qualités de la méthode pour suivre une interface sont valorisées, mais surtout où les phénomènes diffusifs jouent un rôle important pour l'évolution de l'écoulement.

Dans une première étude réalisée pour évaluer la méthode, le choix d'une modélisation par les équations d'Euler monofluide avec miscibilité infinie équivalente est concluante dans une certaine mesure. Les vitesses de fronts données par l'expérience sont retrouvées, mais il n'est pas possible de décrire l'évolution de l'interface comme le font les méthodes numériques les plus performantes.

Pour obtenir un modèle plus précis, on prend en compte une diffusion des espèces. A cette fin, on utilise pour chaque particule, une approche diphasique "bifluide", ainsi qu'une équation de diffusion des espèces. Ce procédé stabilise étonnamment la méthode. C'est un nouveau moyen d'apporter de la stabilité, outre la diffusion et le lissage conservatif.

Mais l'exploitation des résultats et la conclusion sur la précision des calculs sont difficiles à établir, comme cela avait été signalé dans la littérature. En effet, les vitesses de front (c'est-à-dire les nombre de Froude) ne sont pas discriminantes pour définir la meilleure approche sur l'ensemble des régimes. En suivant les choix faits par les différents auteurs confrontés à ce problème, le bon critère est de comparer le développement des instabilités de Kelvin-Helmoltz, et des intrusions des différents fronts. Ce type d'étude est réellement envisageable, en se plaçant à des régimes où la simulation numérique directe est réalisable. Ainsi, le développement des couches de diffusion de la fraction volumique et des instabilités physiques sont aisément mesurables.

Cette validation met en évidence le faible ordre de résolution d'une approche SPH bifluide LW. Une montée en ordre est faite par un traitement spécifique de la partie hyperbolique des équations avec l'usage d'un solveur de Riemann exact. Pour la résolution globale des équations, la méthode SPH modifiée utilise le schéma MUSCL avec limiteur de pente. Ce nouveau modèle permet d'obtenir des résultats de précision équivalente à celle de la méthode eulérienne volumes finis correspondante.

La méthode Smoothed Particle Hydrodynamics peut donc gagner à la fois en ordre et en stabilité par une évolution du formalisme proposé à l'origine [54]. La renormalisation des formules de quadrature, l'approche bifluide du ou des milieu(x) considéré(s), et la résolution séparée de la partie hyperbolique des lois de conservation en sont les facteurs déterminants.

Annexes

Noyaux

Soit $q = r/h$ avec r la norme de \vec{r} et d la dimension spatiale du problème.

Gaussien

$$W(r, h) = \frac{1}{\pi^{\frac{3}{2}} h^d} \exp(-q^2)$$

SuperGaussien

$$W(r, h) = \frac{1}{\pi^{\frac{3}{2}} h^d} \left(\frac{5}{2} - q^2 \right) \exp(-q^2)$$

Spline cubique

$$W(r, h) = \frac{1}{\pi \cdot h^d} \begin{cases} 1 - \frac{3}{2}q^2 + \frac{3}{4}q^3 & \text{si } 0 \leq q \leq 1 \\ \frac{1}{4}(2 - q)^3 & \text{si } 1 \leq q \leq 2 \\ 0. & \text{sinon} \end{cases}$$

Anti-cluster kernel

$$W(r, h) = \frac{1}{\pi \cdot h^d} \begin{cases} \frac{1}{4}(2 - q)^3 & \text{si } 0 \leq q \leq 2 \\ 0. & \text{sinon} \end{cases}$$

Spline quintique

$$W(r, h) = \frac{7}{478\pi h^d} \begin{cases} (3 - q)^5 - 6(2 - q)^5 + 15(1 - q)^5 & \text{si } 0 \leq q \leq 1 \\ (3 - q)^5 - 6(2 - q)^5 & \text{si } 1 \leq q \leq 2 \\ (3 - q)^5 & \text{si } 2 \leq q \leq 3 \\ 0. & \text{sinon} \end{cases}$$

Stockage morse

Les composantes de la matrice sont rangées, comme on l'a vu au-dessus, selon un rang qui correspond à l'indice de création de la particule à laquelle la composante est rattachée. A la différence d'une méthode Eulérienne, la matrice à une distribution des composantes complètement imprévisible interdisant un stockage bande efficace.

La méthode qui nous apparut la meilleure était le stockage morse. Elle permet de gagner jusqu'à 80% de place. Sont stockés :

- Les composantes non-nulles Val[i].
- Leur indice de colonne Col[i].
- Le numéro de composantes globale de la première composante non-nulle de chaque ligne il : ligne[i].

Exemple :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 & 6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 8 \\ 3 & 0 & 0 & 6 & 7 \\ 0 & 0 & 8 & 5 & 10 \\ 7 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Le tableau "ligne" se remplit comme suit :

- ligne[1]=1 (invariable selon les cas).
- ligne[2]=4
- ligne[3]=5
- ligne[4]=8
- ligne[5]=11

et le tableau "colonne" :

- Val[1]=1 et Col[1]=1
- Val[2]=2 et Col[2]=4
- Val[3]=6 et Col[3]=5
- Val[4]=8 et Col[4]=5
- etc

Expressions relatives aux différents ratios de densité

$\gamma = \frac{\rho_l}{\rho_d}$	0.9	0.72	0.46	0.33	0.138	0.1	0.048
$\frac{\rho_d}{\rho_l}$	1.11	1.38	2.18	2.99	7.23	9.93	20.6
$\rho^* = \left(\frac{\rho_d - \rho_l}{\rho_d + \rho_l} \right)^{1/2}$	0.228	0.4	0.61	0.71	0.87	0.9	0.95

Bibliographie

- [1] D.S. Balsara. Von Neumann stability analysis of Smoothed Particle Hydrodynamics - Suggestions for optimal algorithms. *Journal of Computational Physics*, 121 :357–372, 1995.
- [2] S. Benharbit, A. Chalabi, and J.P. Vila. Numerical viscosity, and convergence of finite volume Methods for conservation laws with Boundary conditions. *SIAM*, 3(32) :775–796, 1995.
- [3] T.Brooke Benjamin. Gravity currents and related phenomena. *Journal of Fluid Mechanics*, 31(1) :209–248, 1968.
- [4] B. BenMoussa, N. Lanson, and J.P. Vila. Convergence of Meshless methods for conservation Laws, Applications to Euler equation. Zurich, 1998. VII conference on Hyperbolic problems.
- [5] B. BenMoussa and J.P. Vila. Convergence of SPH methods for scalar non-linear conservation laws. *Society for industrial and Applied Mathematics*, 37(3) :863–8887, 2000.
- [6] W. Benz. SPH : A review. *The numerical Modelling of non-linear Stellar Pulsations*, Kluwer Academic Publishers J.R.Buchler (ed), pages 269–288, 1990.
- [7] W. Benz. Impact simulations with fracture methods and test. *Icarus*, 107 :98 – 116, 1994.
- [8] V. Birman, J.E. Martin, and E. Meiburg. The non-Boussinesq lock exchange problem Part.2 High resolution simulations. *Journal of Fluid Mechanics*, 537 :101–104, 2005.
- [9] J. Bonet and T.-S.L. Lok. Variationnal and momentum preservation aspects of Smoothed Particle Hydrodynamics formulations. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 180 :97–115, 1999.
- [10] A.S. Bonnet-Bendhia, E. Lunéville, and C. Hazard. Résolution Numérique des Equations aux Dérivées Partielles. Ed. ENSTA, 2001/2002. Cours MA 201.
- [11] J.U. Brackbill, D.B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modelling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100 :335–354, 1992.
- [12] L. Brookshaw. Solving the heat diffusion in SPH. In *Workshop SPH in Astrophysics : Mem, S,A,It*, volume 65, pages 1033 –1042, 1994.

- [13] T. Cabaret. Simulation with SPH. Technical report, Stage de fin d'étude - Rapport interne IFP, 2003.
- [14] S. Candel. *Cours de Mécanique des Fluides*. Dunod, 2001.
- [15] G. Chanteperdrix. *Modélisation et simulation numérique d'écoulements diphasiques à interface libre. Application à l'étude des mouvements de liquides dans les réservoirs spatiaux*. PhD thesis, CNES - ONERA, 2004.
- [16] A. Chorin. A numerical method for solving incompressible viscous flows problems. *Journal of Computational Physics*, 135 :118–125, 1997.
- [17] P.W. Cleary and J.J. Monaghan. Conduction modelling using Smoothed Particle Hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 148 :227–264, 1999.
- [18] A. Colagrossi and M. Landrini. Numerical simulation of interfacial flows by SPH. *Journal of Computational Physics*, 191 :448–475, 2003.
- [19] G.H. Cottet and P.D. Koumoutsakos. Vortex methods, theory and practice. *Cambridge University Press*, 2000.
- [20] Pierre-Victor Cueille, Emmanuel Fontaine, and Jean-Paul Vila. Calculs de courant de densité avec la méthode SPH. UTT Troyes, Septembre 2005. Congrès Français de Mécanique.
- [21] Pierre-Victor Cueille, Emmanuel Fontaine, and Jean-Paul Vila. Semi-Implicit numerical simulations of viscous flows with SPH. Trondheim, June 2005. Fourth International Conference on CFD in the Oil and Gas, Metallurgical Process Industries.
- [22] S.J. Cummins and M. Rudman. An SPH projection method. *Journal of Computational Physics*, 152 :584–607, 1999.
- [23] P. Degond and S. Mas-Gallic. The weighted particle method for convection diffusion equations part I-II. *Math. of Comp.*, 53(188) :485–525, 1989.
- [24] M. Doring. *Modélisation et simulation numérique d'écoulements à interface libre par SPH*. PhD thesis, Ecole Centrale Nantes, 2004.
- [25] C.T. Dyka and R.P. Ingel. An approach for tension instability in SPH. *Computers and Structures*, 57(4) :573–580, 1994.
- [26] C.T. Dyka, P.W. Randles, and R.P. Ingel. Stress point for instability in SPH. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 40 :2325–2341, 1997.
- [27] J. Etienne. *Simulations numériques d'écoulements gravitaires à fortes différences de densité*. PhD thesis, INP Grenoble, 2004.
- [28] J. Etienne, E. Hopfinger, and P. Saramito. Numerical simulations of high density ratio lock-exchange flows. *soumis à Physics of Fluid*, 2005.
- [29] M. Firdaouss. Méthodes numériques - Cours de Licence. Université Paris VI, 1999-2000.
- [30] E. Fontaine. On the use of SPH to model breaking waves and their interaction with a structure. Technical report, Rapport interne IFP, 2000.

- [31] M. Gallati and D. Sturla. Impiego della tecnica SPH per simulare la dinamica di flussi liquidi con superficie libera in moto rapidamente variato. *?*
- [32] R.A. Gingold and J.J. Monaghan. Smoothed Particle Hydrodynamics : Theory and application to non-spherical stars. *?*, 1977.
- [33] R.A. Gingold and J.J. Monaghan. Kernel estimates as a basis for general Particle methods in Hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 46 :429–453, 1982.
- [34] H.P. Gröbelbauer, T.K. Fannelop, and Britter R.E. Propagation of intrusions fronts of high density ratios. *Journal of Fluid Mechanics*, 250 :669–687, 1993.
- [35] R. Gutfraind and S. Savage. Smoothed Particle Hydrodynamics for the simulation of broken-ice fields : Mohr-coulomb-type rheology and frictional boundary conditions. *Journal of Computational Physics*, 134 :201–215, 1997.
- [36] C. Härtel, E. Meiburg, and F. Necker. Analysis and direct numerical simulation of the flow at a gravity current head. *Journal of Fluid Mechanics*, 418(1) :189–212, 2000.
- [37] L. Hernquist and N. Katz. TreeSPH : a unification of SPH with the hierarchical tree method. pages 1–27.
- [38] D.L. Hicks, J.W. Swegle, and S.W. Attaway. Conservative Smoothing stabilizes discrete-numerical instabilities in SPH material dynamics computations. *Applied Mathematics and Computations*, 85 :209–226, 1997.
- [39] S.I. Inutsuka. Godunov - type SPH. In *Workshop SPH in Astrophysics : Mem, S,A,It*, volume 65, pages 1027 –1031, 1994.
- [40] R. Issa. Modelisation bidimensionnelle d’un écoulement a surface libre par la methode SPH. Technical report, Rapport interne EDF HP-75/2002/028/A, 2002.
- [41] R. Issa. *Numerical Assessment of the Smoothed Particle Hydrodynamics gridless method for incompressible flows and its extension to turbulent flows*. PhD thesis, UMIST - EDF Chatou, 2005.
- [42] G.R. Johnson and S.R. Beissel. Normalized smoothing functions for SPH impact computations. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 39 :2725–2741, 1996.
- [43] Kamoulakos, Przybylowicz, and Groenenboom. Smoothed particle hydrodynamics for space debris impacts simulations an approach with the pam-shock transient dynamics code.
- [44] J.J. Keller and Y.-P. Chyou. On the hydraulic lockexchange problem. *Z.Angew.Math.Phys.*, 42 :874–909, 1991.
- [45] G.H. Keulegan. The motion of saline fronts in still water. *Natl. Bur. Stand. Rep.*, 5813, 1958.
- [46] J.B. Klemp, R. Rotunno, and W.C. Skamarock. On the dynamic of gravity currents in a channel. *Journal of Fluid Mechanics*, 269 :169–198, 1994.

-
- [47] Ph. Lachamp. *Modélisation numérique de l'effet d'un obstacle sur les écoulements de fluides à seuil par la méthode SPH*. PhD thesis, Université Joseph Fourier - Cemagref Grenoble, 2003.
 - [48] Ph. Lachamp, Th. Faug, M. Naaim, and D. Laigle. Simulation of the effect of defence structures on granular flows using SPH. *Natural Hazard and Earth System Science*, 2 :203–209, 2000.
 - [49] E. Larrey, A. Merlo, J.P. Vila, and Rompteaux A. Numerical simulation of liquid jets in subsonic and supersonic gas stream. 1998.
 - [50] J.C. Lattanzio, J.J. Monaghan, H. Pongracic, and M.P. Schwarz. Controlling penetration. *Society for Industrial and Applied Mathematics*, 7(2) :591–598, 1986.
 - [51] A. Letellier. *Modélisation des impacts d'oiseaux sur les aubes des réacteurs d'avion*. PhD thesis, Université d'Evry- SNECMA, 1996.
 - [52] L.D. Libersky, A.G. Petschek, T.C. Carney, J.R. Hipp, and F.A. Allahdadi. High strain lagrangian hydrodynamics. a three-dimensional SPH code for dynamic material response. *Journal of Computational Physics*, 109 :67–75, 1993.
 - [53] R.J. Lowe, J.W. Rottman, and P.F. Linden. The non-Boussinesq lock exchange problem Part.1 Theory and experiments. *Journal of Fluid Mechanics*, 537 :125–144, 2005.
 - [54] L.B. Lucy. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *the Astronomical Journal*, 82(12) :1013–1024, 1977.
 - [55] S. Mas-Gallic and P.A. Raviart. A Particle method for first order symmetric systems. *Numerische Mathematik*, 51 :323–352, 1987.
 - [56] J.J. Monaghan. An introduction to SPH. *Computers Physics Communications*, 48 :84–96, 1988.
 - [57] J.J. Monaghan. On the problem of penetration in particle methods. *Academic Press*, pages 1–13, 1988.
 - [58] J.J. Monaghan. Smoothed Particle Hydrodynamics. *Annual Review Astronomy and Astrophysics*, 30 :543–574, 1992.
 - [59] J.J. Monaghan. Simulating free surface flows with SPH. *Journal of Computational Physics*, 110 :399–406, 1994.
 - [60] J.J. Monaghan. Implicit SPH drag and dusty gas dynamics. *Journal of Computational Physics*, 138 :801–820, 1997.
 - [61] J.J. Monaghan. SPH and Riemann Solvers. *Journal of Computational Physics*, 136 :298–307, 1997.
 - [62] J.J. Monaghan, R.A.F. Cas, A.M. Kos, and M. Hallworth. Gravity currents descending a ramp in a stratified tank. *Journal of Fluid Mechanics*, 379 :39 – 69, 1998.
 - [63] J.J. Monaghan and A. Kocharyan. SPH simulations on multiphase flows. *Computers Physics Communications*, 87 :225 – 235, 1995.

-
- [64] J.J. Monaghan and A.M. Kos. Solitary waves on a cretan beach. *Journal of waterway, port , coastal and ocean engineering*, pages 145 – 154, 1999.
- [65] J.P. Morris. Simulating tension surface with SPH. *Journal of Computational Physics*, 136 :214–226, 1997.
- [66] J.P. Morris, P.J. Fox, and Y. Zhu. Modeling low reynolds number incompressible flows using SPH. *Journal of Computational Physics*, 136 :214–226, 1997.
- [67] J.P. Morris and J.J. Monaghan. A switch to reduce SPH viscosity. *Journal of Computational Physics*, 136 :41–50, 1997.
- [68] B. Nayroles, J. Touzot, and P. Villon. Generalizing the finite element method : Diffuse approximation and diffuse element. *Comput. Mech.*, 10 :307–318, 1992.
- [69] University of Macau. <http://www.fst.umac.mo>.
- [70] L. Oger and S. Savage. SPH for cohesive grain. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 180 :169–183, 1999.
- [71] S. Potapov, M. Hunt, and Campbell. Liquid solids flows using SPH and DEM. *Powder Technology*, 116 :2024 – 213, 2001.
- [72] Première Ecole d’été sur SPH ECL Lyon. *Conférence sur Modèle BiFluide*. Vila, J.P., 2005.
- [73] P.W. Randles and L. Libersky. SPH : some recent improvements and applications. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 139 :375–408, 1996.
- [74] E. Rivoalen and S. Huberson. Numerical simulation of axisymmetric viscous flows by means of a particle method. *Journal of Computational Physics*, 152 :1–31, 1999.
- [75] M. Sawley, P.W. Cleary, and J. Ha. Using SPH for industrial flow simulations. In *Second conference International on CFD in the minerals and process Industries*, 2000.
- [76] B. Schlatter. A pedagogical tool using SPH to model fluid past a system of cylinders. Technical report, 1999.
- [77] J.O. Shin, S.B. Dalziel, and P.F. Linden. Gravity currents produced by lock exchange. *Journal of Fluid Mechanics*, 537 :125–144, 2004.
- [78] Simpson. <http://www.damtp.cam.ac.uk/>.
- [79] J.W. Swegle, D.L. Hicks, and S.W. Attaway. Smoothed Particle Hydrodynamics stability analysis. *Journal of Computational Physics*, 116 :123–134, 1995.
- [80] H. Takeda, S.M. Miyama, and M. Sekiya. Numerical simulation of viscous flow by Smoothed Particle Hydrodynamics. *Progress of Theoretical Physics*, 92 :939–960, 1994.
- [81] J. Trapy, P.V. Cueille, and E. Fontaine. Calculs de benchmarks pour l’Ecole d’Eté SPH. Technical report, Note technique Externe - IFP - Division Mécanique Appliquée, 2005.
- [82] J.P. Vila. Communication personnelle.

-
- [83] J.P. Vila. Méthodes particulières régularisées. développement récents et nouvelles applications. In *ESAIM proceedings*, volume 3, pages 131–146, 1997.
 - [84] J.P. Vila. On particle weighted methods and Smoothed particle Hydrodynamics. *Mathematical Models and Applied Sciences*, 2000.
 - [85] J.P. Vila. SPH renormalized hybrid methods for conservation laws. applications to free surface flows. Technical report, Rapport ONERA/MIP, 2003.
 - [86] D. Violeau and S. Piccon. Prise en compte des effets turbulents dans la méthode numérique SPH - introduction d'un modèle de viscosité turbulente et d'un modèle stochastique. Technical report, Rapport interne EDF HP-75/02/005/A, 2002.
 - [87] J. Von Neumann and R.D. Richtmyer. A method for the numerical calculation of Hydrodynamic shocks. *Journal of Applied Physics*, 21 :232–237, 1950.
 - [88] S.J. Watkins, A. Bhattal, N. Francis, J.A. Turner, and Whitworth A.P. A new prescription for viscosity in SPH. *Astrophys. J. Suppl.*, (119) :177 – 187, 1996.
 - [89] W. C. Welton. Two-dimensional pdf/SPH simulations of compressible turbulent flows. *Journal of Computational Physics*, 139 :410–443, 1998.
 - [90] W. C. Welton and S.B. Pope. Pdf model calculations of compressible turbulent flows using Smoothed Particle Hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 134 :150–168, 1997.
 - [91] F.A. Williams. *Combustion Theory*. The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc 2nd Edition, 2001.